



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2016년11월28일
 (11) 등록번호 10-1680093
 (24) 등록일자 2016년11월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C07D 495/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
 H01L 51/42 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2014-0086820
 (22) 출원일자 2014년07월10일
 심사청구일자 2014년07월10일
 (65) 공개번호 10-2015-0085766
 (43) 공개일자 2015년07월24일
 (30) 우선권주장
 1020140005580 2014년01월16일 대한민국(KR)
 (56) 선행기술조사문헌
 KR1020140097044 A*
 Org Lett, 14(6), 1500-1503 (2012)*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
 덕산네오룩스 주식회사
 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32
 (72) 발명자
 김유리
 강원도 원주시 라용정길 68-4
 이선희
 충청남도 천안시 서북구 성정공원6길 23-6, 406호
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
 김정은

전체 청구항 수 : 총 10 항

심사관 : 정현아

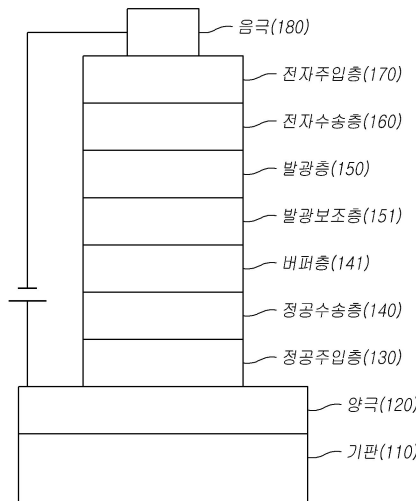
(54) 발명의 명칭 **유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치**

(57) 요약

화학식 1에 의해 표시되는 화합물이 개시된다. 또한, 제 1전극, 제 2전극 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이의 유기물층을 포함하는 유기전기소자가 개시되며, 이때 상기 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 유기물층에 화학식 1로 표시되는 화합물이 포함되면, 발광효율, 안정성 및 수명 등이 향상될 수 있다.

대표도 - 도1

100



(72) 발명자

김원삼

경기도 화성시 동탄공원로 21-13(능동)
모아미래도APT 947동 705호

김혜령

충청남도 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 19-1 신비
텔 302호

정호영

경기도 김포시 고촌읍 인향로24번길 72

박정환

경기도 화성시 동탄공원로 21-12 푸른마을포스코더
샵아파트 907동 2401호

황선필

경기도 안산시 상록구 광덕산3로 68 (월피동) 301
호

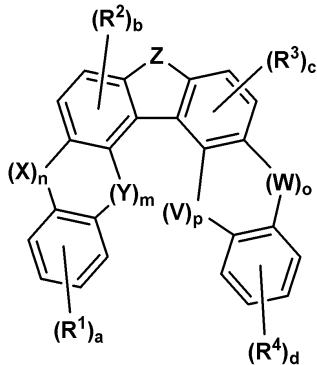
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1에서,

Z는 S이고, X, Y, V 및 W는 서로 독립적으로 $N(R^6)$, S 또는 O 이며,

m, n, o 및 p는 0 또는 1이며, m+n은 1 이상이고, o+p도 1 이상이며,

R^6 은 C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; $-L'-N(Ar^1)(Ar^2)$; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되고,

R^1 내지 R^4 는 서로 독립적으로, i) 중수소; 할로젠; C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; C_6-C_{30} 의 아릴옥시기; $-L'-N(Ar^1)(Ar^2)$; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성하고, R^1 내지 R^4 중에서 고리를 형성하지 않은 기는 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며,

a 및 d는 각각 0~4의 정수이고, b 및 c는 각각 0~2의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 복수의 R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 각각은 서로 같거나 상이하며,

상기 L'은 단일결합; C_6-C_{60} 의 아틸렌기; 플루오렌일렌기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며, Ar^1 및 Ar^2 는 서로 독립적으로 C_6-C_{60} 의 아틸기; 플루오렌일기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되고, 여기서 L'은 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C_1-C_{20} 의 알킬사이오기;

C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있고,

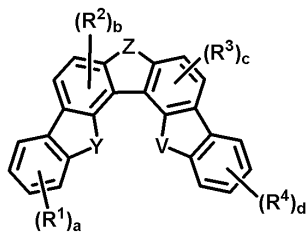
R¹ 내지 R⁴, R⁶, Ar¹ 및 Ar²가 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기 또는 융합고리기인 경우와, R⁶이 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기, 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있다.

청구항 2

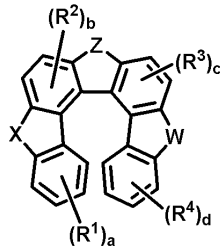
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 4 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

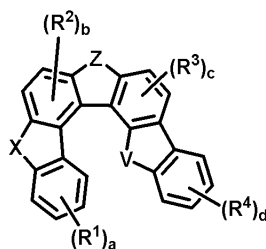
<화학식 2>



<화학식 3>



<화학식 4>

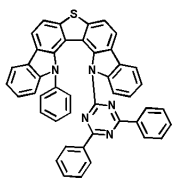


상기 화학식 2 내지 화학식 4에서, V, W, X, Y, Z, R¹ 내지 R⁴, a, b, c 및 d는 제 1항에서 정의된 것과 동일하다.

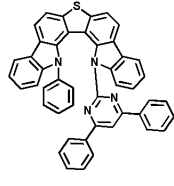
청구항 3

제 1항에 있어서,

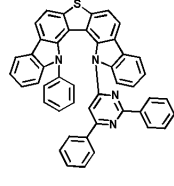
상기 화학식 1은 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:



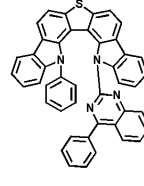
1-1



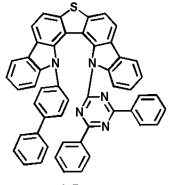
1-2



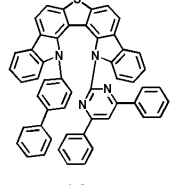
1-3



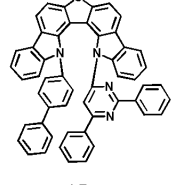
1-4



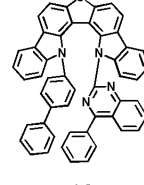
1-5



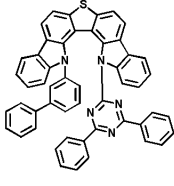
1-6



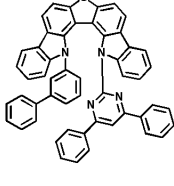
1-7



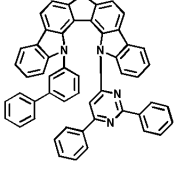
1-8



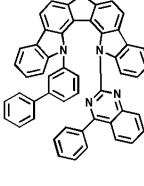
1-9



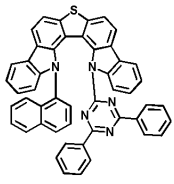
1-10



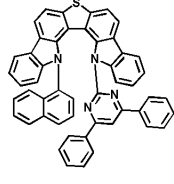
1-11



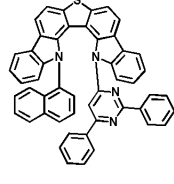
1-12



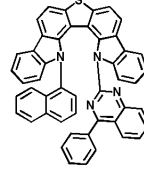
1-13



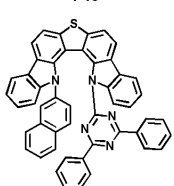
1-14



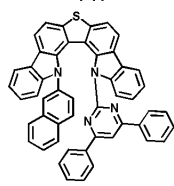
1-16



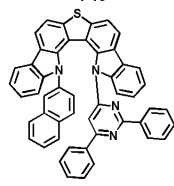
1-16



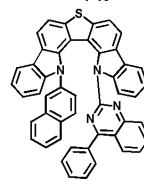
1-17



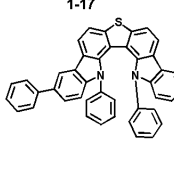
1-18



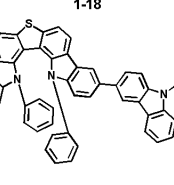
1-19



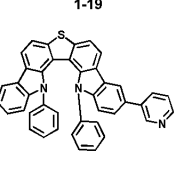
1-20



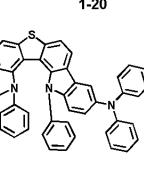
1-21



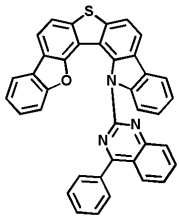
1-22



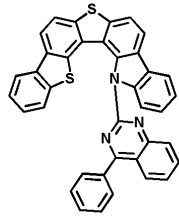
1-23



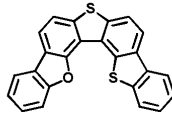
1-24



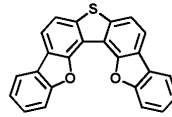
2-37



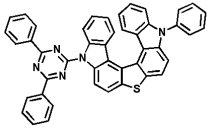
2-38



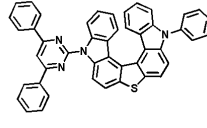
2-39



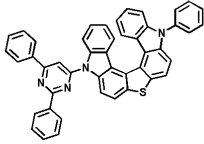
2-40



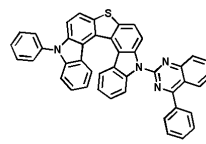
3-1



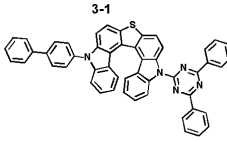
3-2



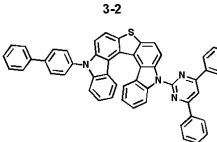
3-3



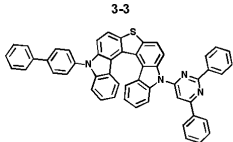
3-4



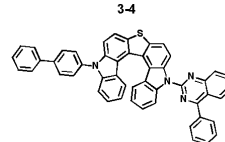
3-5



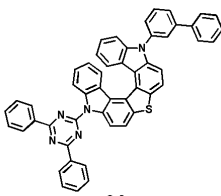
3-6



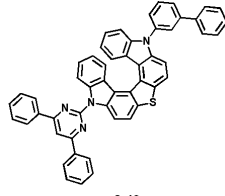
3-7



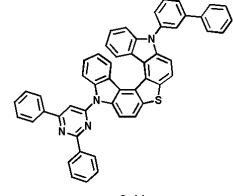
3-8



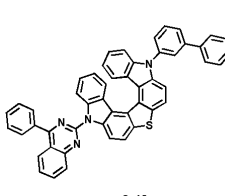
3-9



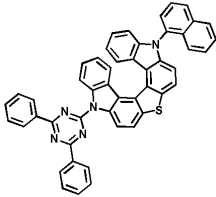
3-10



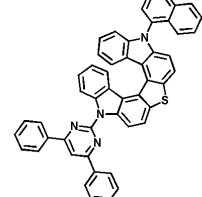
3-11



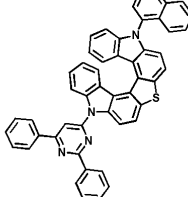
3-12



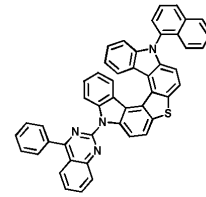
3-13



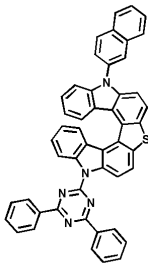
3-14



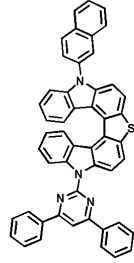
3-15



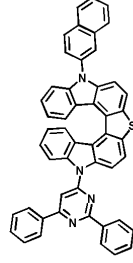
3-16



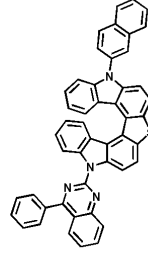
3-17



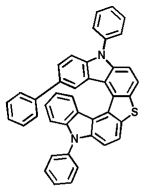
3-18



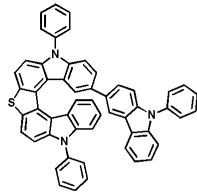
3-19



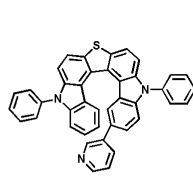
3-20



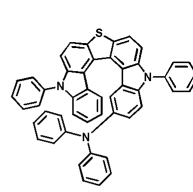
3-21



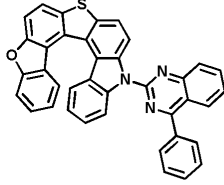
3-22



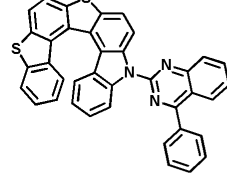
3-23



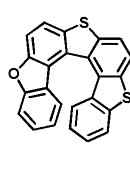
3-24



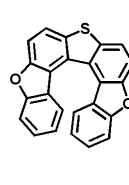
4-37



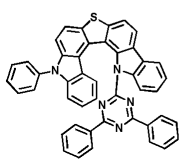
4-38



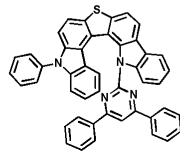
4-39



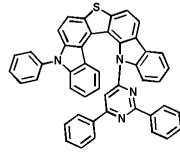
4-40



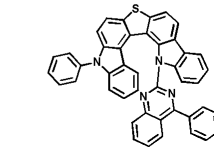
5-1



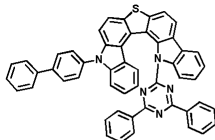
5-2



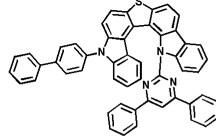
5-3



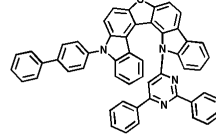
5-4



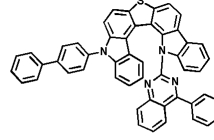
5-5



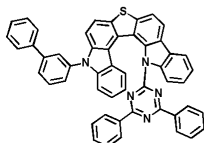
5-6



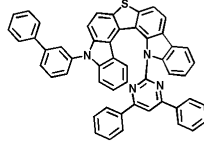
5-7



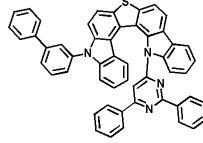
5-8



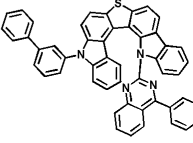
5-9



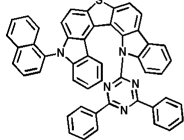
5-10



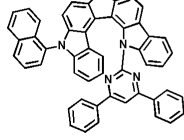
5-11



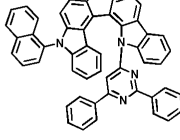
5-12



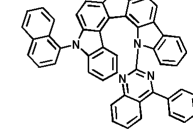
5-13



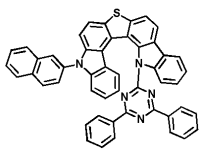
5-14



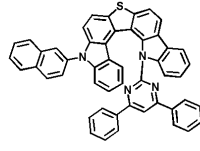
5-16



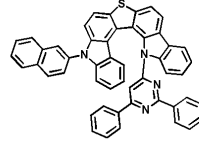
5-16



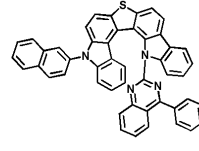
5-17



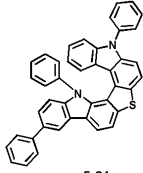
5-18



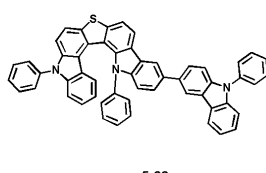
5-19



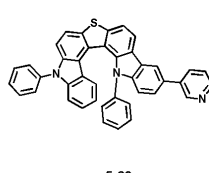
5-20



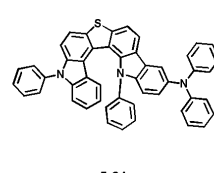
5-21



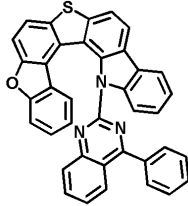
5-22



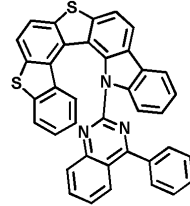
5-23



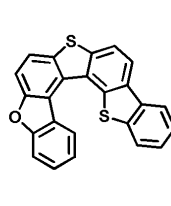
5-24



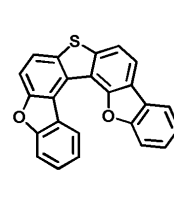
6-37



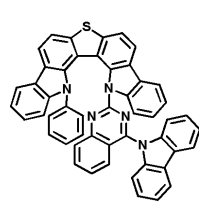
6-38



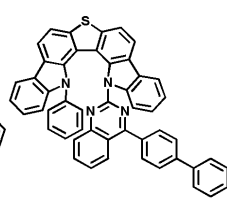
6-39



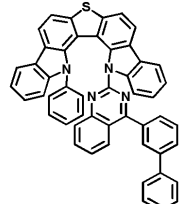
6-40



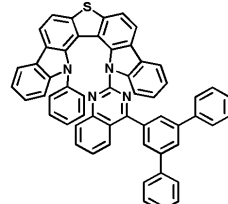
8-1



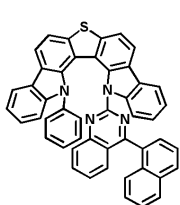
8-2



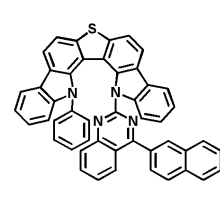
8-3



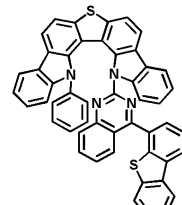
8-4



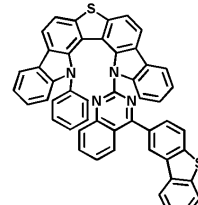
8-5



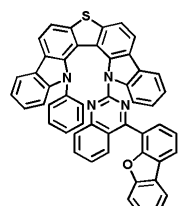
8-6



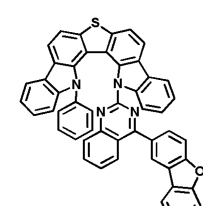
8-7



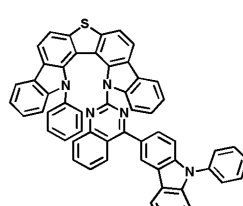
8-8



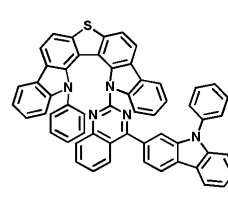
8-9



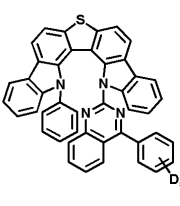
8-10



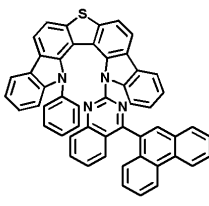
8-11



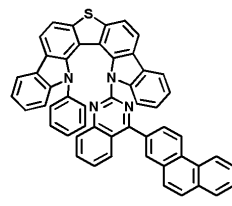
8-12



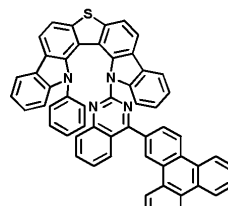
8-13



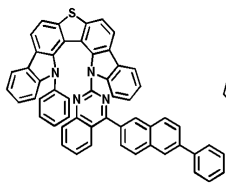
8-14



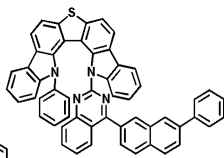
8-15



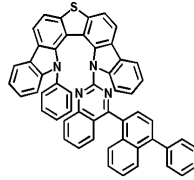
8-16



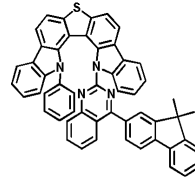
8-17



8-18



8-19



8-20

청구항 4

제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 유기전기소자.

청구항 5

제 4항에 있어서,

제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하며 상기 화합물이 함유된 유기물층;을 포함하며,

상기 화합물은 1종 단독 또는 2종 이상의 혼합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 6

제 5항에 있어서,

상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층 중 적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 7

제 5항에 있어서,

상기 제 1전극과 제 2전극의 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

청구항 8

제 5항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 몰투몰 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 9

제 4항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및

상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

청구항 10

제 9항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물 층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.
- [0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [0004] 그리고, 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0005] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [0006] 현재 휴대용 디스플레이 시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리는 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 매우 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 하는 상황이다.
- [0007] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 늘어나는 경향을 나타낸다. 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다. 따라서 높은 열적 안정성을 가지며 발광층 내에서 효율적으로 전하 균형(charge balance)을 이룰 수 있는 발광 재료의 개발이 필요한 실정이다.
- [0008] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 반드시 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 존재하여야 하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광보조층의 개발이 필요한 시점이다.
- [0009] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다. 하지만 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기 때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 계면에서 발광하게 된다.
- [0010] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서 높은 T1 값을 가지며, 정공 수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 발광보조층이 개발이 절실히 요구된다.
- [0011] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광층의 호스트 물질과 발광보조층 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.
- [0012] 본 발명의 배경이 되는 기술은 하기 특허문헌에 기재된 공보에 개시되어 있다.

선행기술문헌

특허문헌

- [0013] (특허문헌 0001) 미국 특허공보 US6596415(2003.7.22)
- (특허문헌 0002) 미국 특허공보 US6465115(2002.10.15)
- (특허문헌 0003) 국제공개공보 W02009/148015(2009.12.10)

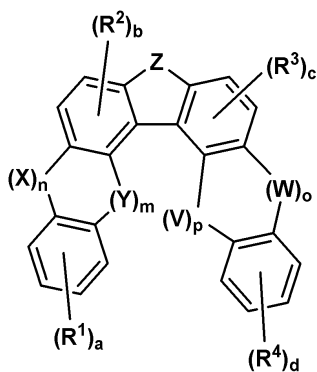
발명의 내용

해결하려는 과제

- [0014] 본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

- [0015] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.



[0016]

- [0017] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

- [0018] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0019] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0020] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.
- [0021] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.
- [0022] 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 구성 요소가 다른 구성 요소 "위에" 또는 "상에" 있다고 하는 경우, 이는 다른 구성 요소 "바로

위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 구성 요소가 있는 경우도 포함할 수 있다고 이해되어야 할 것이다. 반대로, 어떤 구성 요소가 다른 부분 "바로 위에" 있다고 하는 경우에는 중간에 또 다른 부분이 없는 것을 뜻한다고 이해되어야 할 것이다.

[0023] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.

[0024] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.

[0025] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[0026] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.

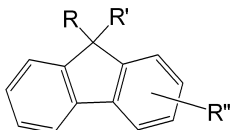
[0027] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0028] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0029] 본 발명에 사용된 용어 "알콕시기" 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0030] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

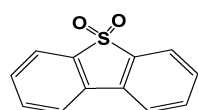
[0031] 본 발명에 사용된 용어 "플루오렌일기" 또는 "플루오렌일렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하기 구조에서 R, R' 및 R"이 모두 수소인 1가 또는 2가 작용기를 의미하며, "치환된 플루오렌일기" 또는 "치환된 플루오렌일렌기"는 치환기 R, R', R" 중 적어도 하나가 수소 이외의 치환기인 것을 의미하며, R과 R'이 서로 결합되어 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성한 경우를 포함한다.



[0032] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일고리형, 고리접합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함한다.

[0034] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"와 같은 방향족 고리뿐만 아니라 비방향족 고리도 포함하며, 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 고리를 의미하나 여기에 제한되는 것은 아니다. 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타내며, 헤테로고리기는 헤테로원자를 포함하는 단일고리형, 고리접합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 의미한다.

[0035] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.



[0036] 본 발명에서 사용된 용어 "고리"는 단일환 및 다환을 포함하며, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함하고, 방향족 및 비방향족 고리를 포함한다.

[0038] 본 발명에서 사용된 용어 "다환"은 바이페닐, 터페닐 등과 같은 고리 집합체(ring assemblies), 접합된(fused) 여러 고리계 및 스파이로 화합물을 포함하며, 방향족뿐만 아니라 비방향족도 포함하고, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함한다.

[0039] 본 발명에서 사용된 용어 "고리 집합체(ring assemblies)"는 둘 또는 그 이상의 고리계(단일고리 또는 접합된 고리계)가 단일결합이나 또는 이중결합을 통해서 서로 직접 연결되어 있고 이와 같은 고리 사이의 직접 연결의 수가 이 화합물에 들어 있는 고리계의 총 수보다 1개가 적은 것을 의미한다. 고리 집합체는 동일 또는 상이한 고리계가 단일결합이나 이중결합을 통해 서로 직접 연결될 수 있다.

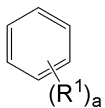
[0040] 본 발명에서 사용된 용어 "접합된 여러 고리계"는 적어도 두개의 원자를 공유하는 접합된(fused) 고리 형태를 의미하며, 둘 이상의 탄화수소류의 고리계가 접합된 형태 및 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리계가 적어도 하나 접합된 형태 등을 포함한다. 이러한 접합된 여러 고리계는 방향족고리, 헤테로방향족고리, 지방족 고리 또는 이들 고리의 조합일 수 있다.

[0041] 본 발명에서 사용된 용어 "스파이로 화합물"은 '스파이로 연결(spiro union)'을 가지며, 스파이로 연결은 2개의 고리가 오로지 1개의 원자를 공유함으로써 이루어지는 연결을 의미한다. 이때, 두 고리에 공유된 원자를 '스파이로 원자'라 하며, 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각 '모노스파이로-', '디스파이로-', '트라이스파이로-' 화합물이라 한다.

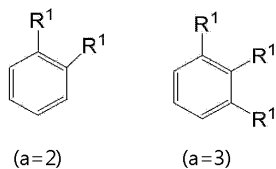
[0042] 또한, 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕시카르보닐기의 경우 알콕시기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

[0043] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬아민기, C₁-C₂₀의 알킬티오젠기, C₆-C₂₀의 아릴티오젠기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₆-C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[0044] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.



[0045] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R¹은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.



[0047] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[0049] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기관(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이

캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

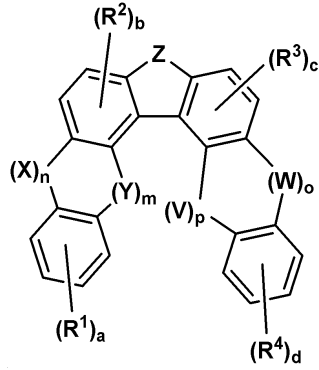
- [0050] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 이들 층 중 적어도 하나가 생략되거나, 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등이 더 포함될 수도 있으며, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.
- [0051] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.
- [0052] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150), 광효율 개선층, 발광보조층 등의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 일례로, 본 발명의 화합물은 발광보조층(151) 및/또는 발광층(150) 재료로 사용될 수 있다.
- [0053] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브 치환체의 조합이 매우 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.
- [0054] 이미 설명한 것과 같이, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층을 형성하는 것이 바람직하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 대응하여 서로 다른 발광 보조층을 형성하는 것이 필요하다. 한편, 발광보조층의 경우 정공수송층 및 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야하므로 유사한 코어를 사용하더라도 사용되는 유기물층이 달라지면 그 특징을 유추하기는 매우 어려울 것이다.
- [0055] 따라서, 본 발명의 화학식 1에 따른 화합물을 사용하여 발광층 및/또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T_1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.
- [0056] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 다양한 증착법(deposition)을 이용하여 제조될 수 있을 것이다. PVD나 CVD 등의 증착 방법을 사용하여 제조될 수 있는데, 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을 추가로 형성할 수 있다.
- [0057] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 물투물 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조될 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.
- [0058] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [0059] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.
- [0060] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.
- [0061] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말

일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[0062] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.

[0063] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0064] <화학식 1>



[0065] 상기 화학식 1에 기재된 각 기호는 아래와 같이 정의될 수 있다.

[0067] 상기 화학식 1에서, Z는 S 또는 NR⁵이고, V, W, X, Y는 서로 독립적으로 NR⁶, S 또는 O이다. 단, Z가 NR⁵인 경우에 X, Y, V 및 W 중 적어도 하나는 NR⁶이 아니다. 즉, X, Y, V, W, Z 모두가 아민기인 경우는 제외한다.

[0068] m, n, o 및 p는 각각 0 또는 1의 정수이며, m+n은 1 이상이고, o+p도 1 이상이다. 이때, m, n, o 및 p가 0인 경우는 단일결합을 의미한다.

[0069] 예컨대, m+n이 1 이상인 경우는 X 및 Y 중 적어도 하나가 NR⁶, S 또는 O이며, 마찬가지로 o+p가 1 이상인 경우는 V 및 W 중 적어도 하나가 NR⁶, S 또는 O인 것을 의미한다. 즉, m+n이 0인 경우 및/또는 o+p가 0인 경우에 해당하는 화합물은 제외한다. 따라서, X와 Y를 포함하는 링은 오각링 또는 육각링이 될 수 있으며, V 및 W를 포함하는 링 또한 오각링 또는 육각링이 될 수 있다.

[0070] 구체적으로, i) Z가 NR⁵인 경우, V 및 W 중 적어도 하나는 NR⁶, S 또는 O 중에서 선택되고, X 및 Y 중 적어도 하나는 NR⁶, S 또는 O 중에서 선택되되, V, W, X 및 Y가 모두 NR⁶인 경우는 제외하며, ii) Z가 S 인 경우에는 V 및 W 중 적어도 하나는 NR⁶, S 또는 O 중에서 선택되고, X 및 Y 중 적어도 하나는 NR⁶, S 또는 O 중에서 선택될 수 있다. 다만, 어느 경우이든 X와 Y 중 적어도 하나는 단일결합이 아니고, V와 W 중 적어도 하나 또한 단일결합이 아닌 것이 바람직하다.

[0071] 상기 R⁵ 및 R⁶은 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; -L'-N(Ar¹)(Ar²); 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0072] 바람직하게는, R⁵ 및 R⁶은 서로 독립적으로, C₆-C₂₅의 아릴기, C₃-C₁₂의 헤테로고리기, 플루오렌일기 또는 -L'-N(Ar¹)(Ar²) 등일 수 있고, 또한 바람직하게는 C₆, C₁₀, C₁₂의 아릴기, C₃, C₄, C₈, C₁₂의 헤테로고리기일 수 있고, 구체적으로 페닐기, 비페닐릴기, 나프틸기, 메틸 또는 페닐로 치환 또는 비치환된 플루오렌일기, 스퀴아로바이플루오렌일기, 페닐로 치환 또는 비치환된 트리아진일기, 페닐로 치환 또는 비치환된 피리미딘일기, 페닐, 나프틸, 비페닐, 터페닐, 페난트렌일, 트리페닐, 플루오렌일, 카바졸, 디벤조싸이엔일 또는 디벤조퓨릴로 치환 또는 비치환된 퀴나졸린일기 또는 디벤조싸이엔일기 등일 수 있다.

[0073] 바람직하게는, R⁵ 및 R⁶은 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기;

니트로기; C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.

[0074] 상기 화학식 1에서, R¹ 내지 R⁴는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; -L'-N(Ar¹)(Ar²); 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 상기 a 및 d는 각각 0~4의 정수이고, b 및 c는 각각 0~2의 정수이며, a가 2 이상인 경우 R¹은 서로 동일하거나 상이하며, b가 2인 경우 R²는 서로 동일하거나 상이하며, c가 2인 경우 R³은 서로 동일하거나 상이하며, d가 2 이상인 경우 R⁴는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0075] 바람직하게는, R¹ 내지 R⁴는 서로 독립적으로, 수소, C₆-C₁₈의 아릴기, C₃-C₁₂의 헤테로고리기, 또는 디페닐아민기 동일 수 있고, 또한 바람직하게는 C₆의 아릴기, C₅, C₁₂의 헤테로고리기일 수 있고, 구체적으로 페닐기, 피리딜기, 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸일기 동일 수 있다.

[0076] 또한, R¹ 내지 R⁴는 각각 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있다. 이때, 고리를 형성하지 않은 R¹ 내지 R⁴는 각각 상기에서 정의된 것과 동일하다. 이때 형성되는 고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

[0077] 바람직하게는, R¹ 내지 R⁴는 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.

[0078] 상기 L'은 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0079] 바람직하게는, L'은 단일결합, C₆-C₁₈의 아릴렌기, C₃-C₁₂의 헤테로고리기, 또는 플루오렌일렌기 동일 수 있고, 또한 바람직하게는 C₆, C₁₂의 아릴렌기, C₄, C₁₂의 헤테로고리기일 수 있고, 구체적으로 페닐렌기, 비페닐렌기, 메틸로 치환 또는 비치환된 플루오렌일렌기, 피리미딘일기, 디벤조싸이엔일렌기 또는 페닐로 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기 동일 수 있다.

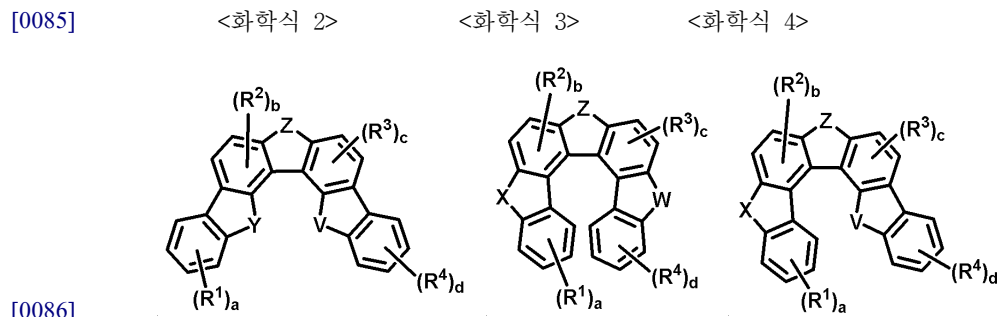
[0080] 바람직하게는, L'은 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.

[0081] 상기 Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0082] 바람직하게는, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로, C₆-C₁₈의 아릴기, C₃-C₁₂의 헤테로고리기, 또는 플루오렌일기 등일 수 있고, 또한 바람직하게는 C₆, C₁₀, C₁₂의 아릴기, C₃, C₁₂의 헤테로고리기 일 수 있고, 구체적으로 페닐기, 나프틸기, 비페닐릴기, 메틸 또는 페닐로 치환 또는 비치환된 플루오렌일기, 페닐로 치환 또는 비치환된 트리아진일기 또는 디벤조싸이엔일기 등일 수 있다.

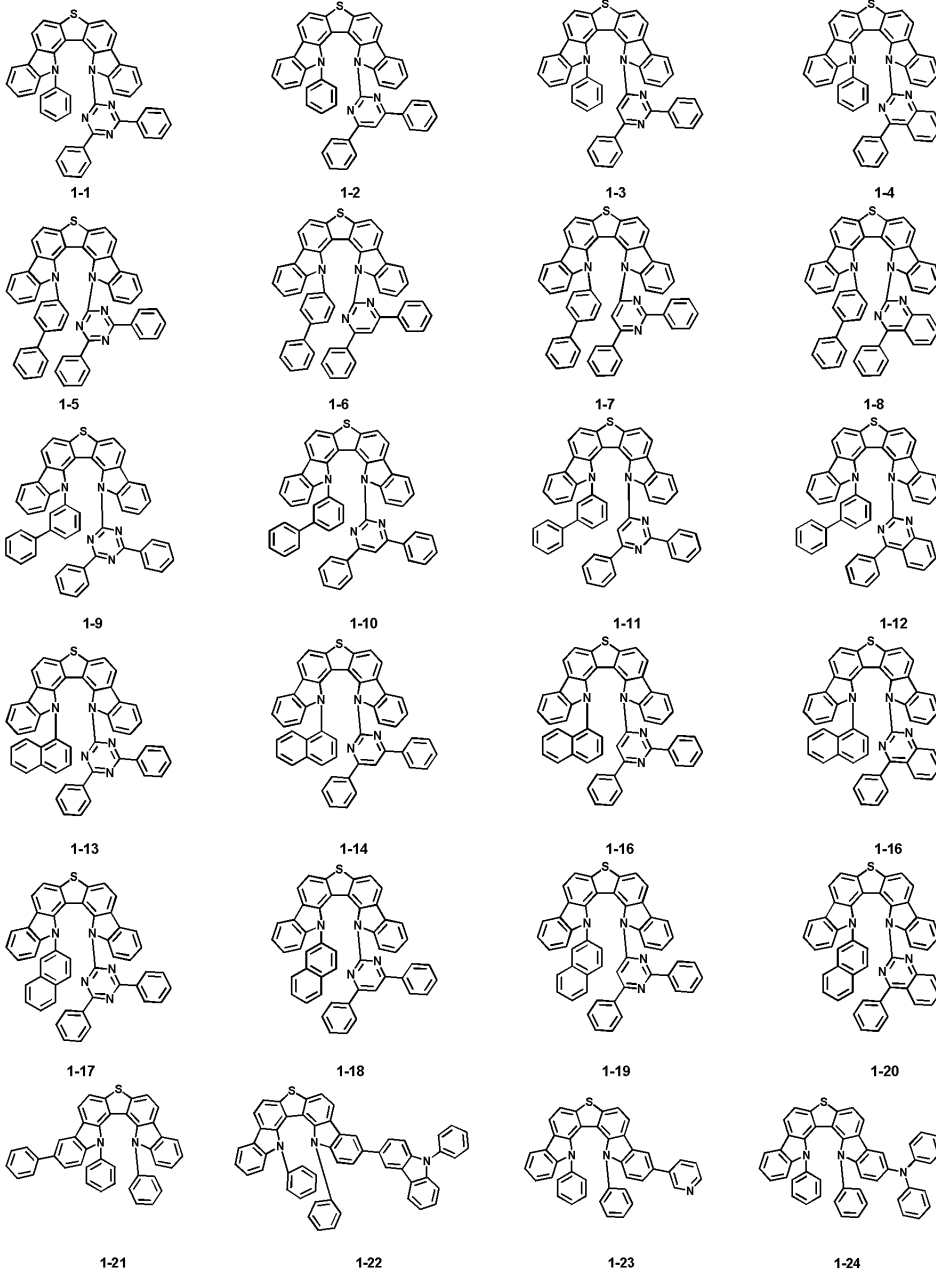
[0083] 바람직하게는, Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₂₀의 알킬싸이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있다.

[0084] 구체적으로, 상기 화학식 1에서, m, n, o 및 p의 조합에 따른 화학식은 하기 화학식 2 내지 4 중 하나로 표시될 수 있다. 하기 화학식 2는 m이 1, n이 0이며, o가 0, p가 1인 경우의 예이고, 하기 화학식 3은 m이 0, n이 1이며, o가 1, p가 0인 경우의 예이며, 하기 화학식 4는 m이 0, n이 1이며, o가 0, p가 1인 경우의 예이다.

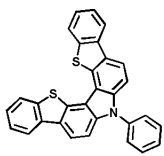


[0087] 상기 화학식 2 내지 화학식 4에서, V, W, X, Y, Z, R¹-R⁴, a, b, c 및 d는 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하게 정의될 수 있다.

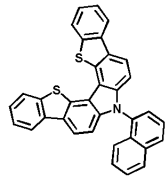
[0088] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있다.



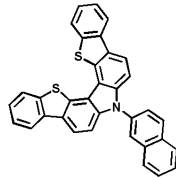
[0089]



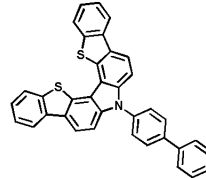
2-1



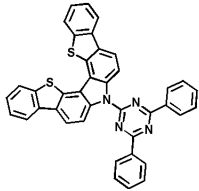
2-2



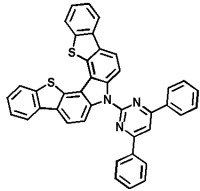
2-3



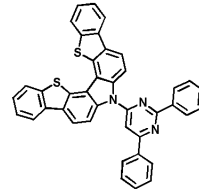
2-4



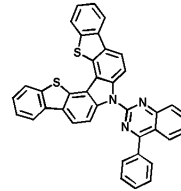
2-5



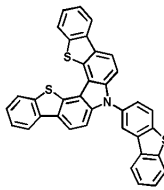
2-6



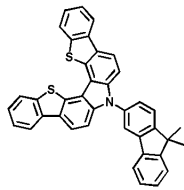
2-7



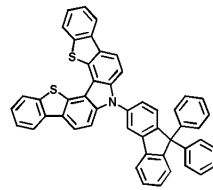
2-8



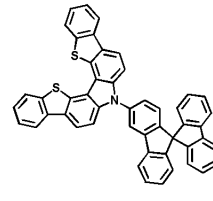
2-9



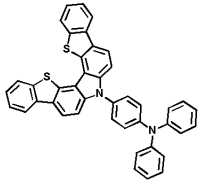
2-10



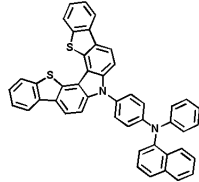
2-11



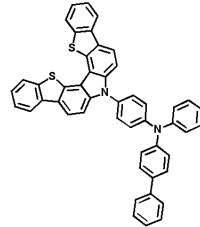
2-12



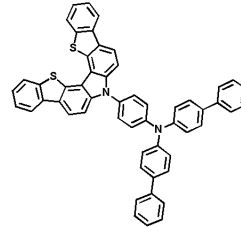
2-13



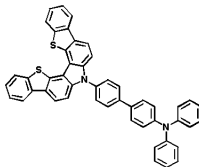
2-14



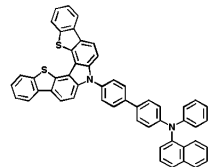
2-15



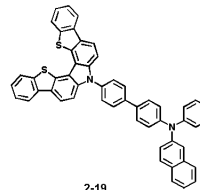
2-16



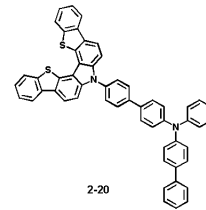
2-17



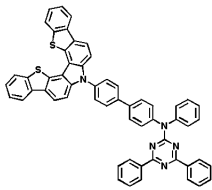
2-18



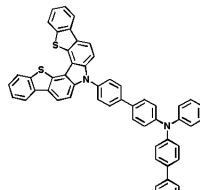
2-19



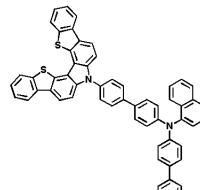
2-20



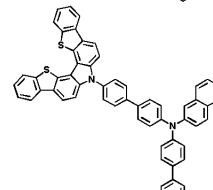
2-21



2-22

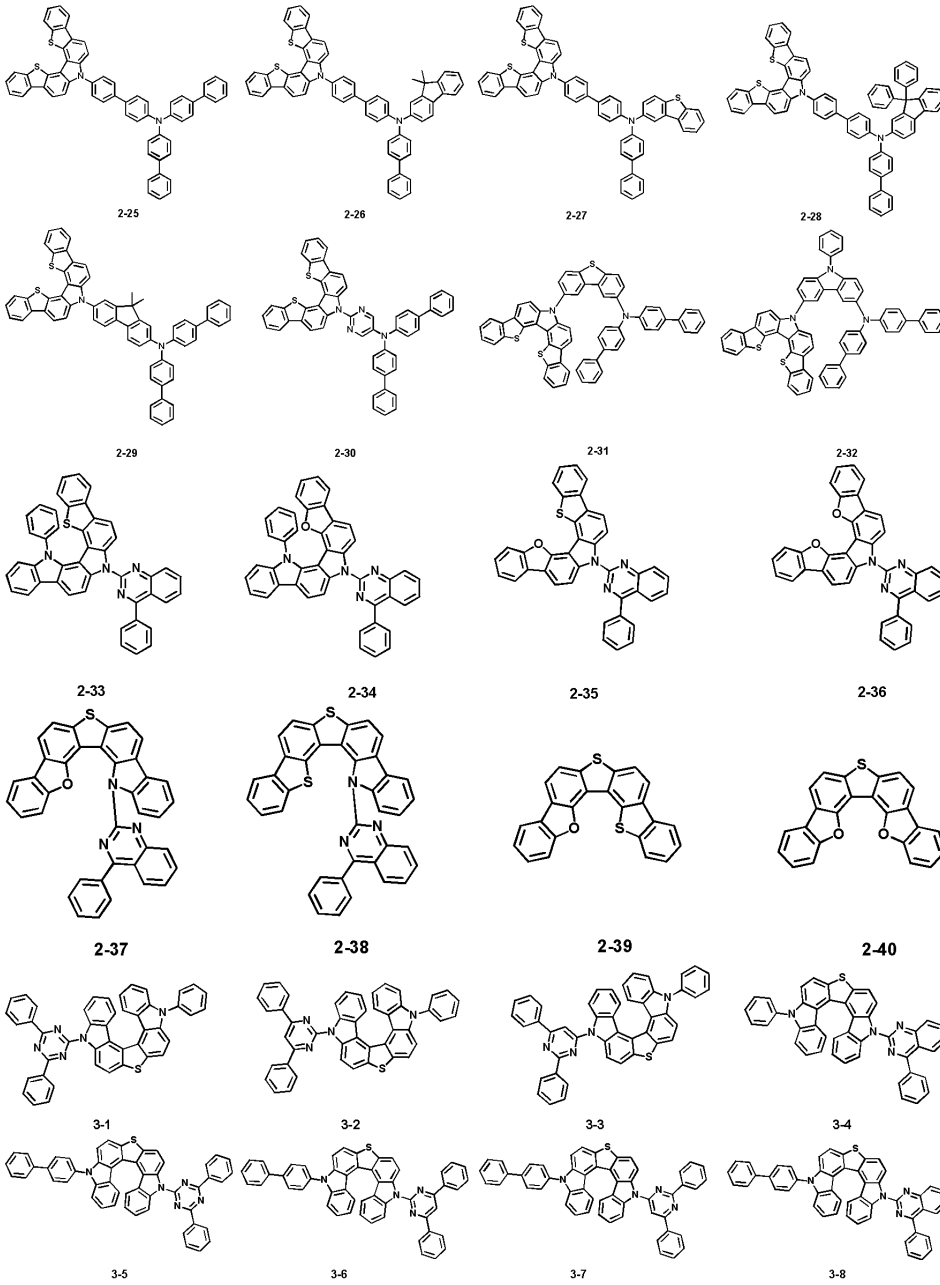


2-23

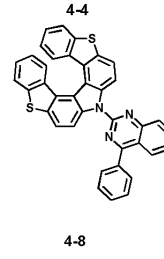
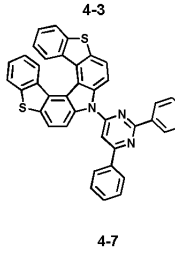
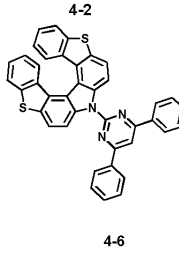
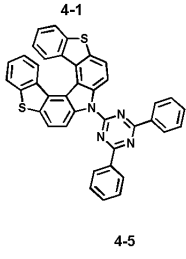
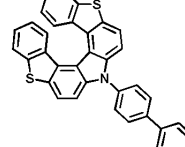
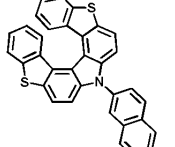
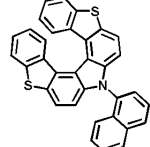
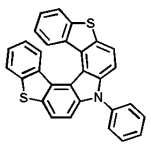
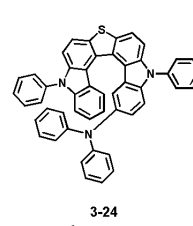
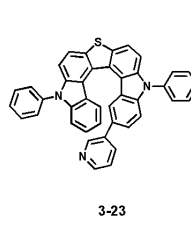
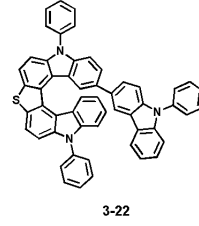
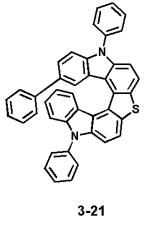
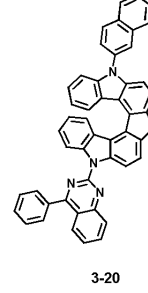
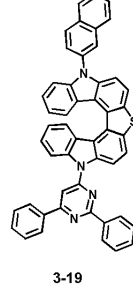
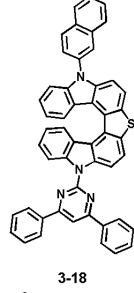
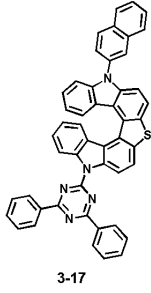
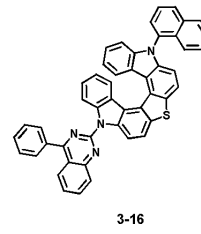
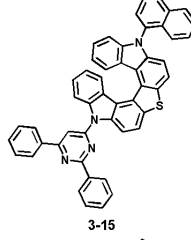
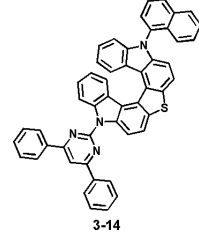
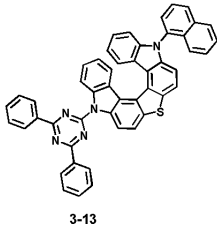
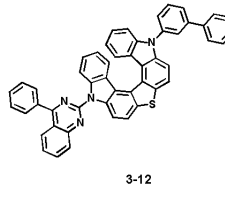
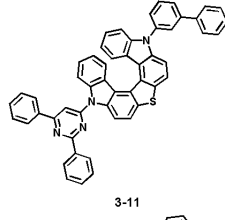
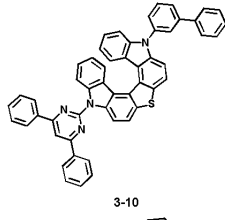
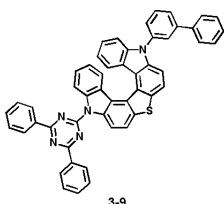


2-24

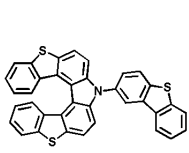
[0090]



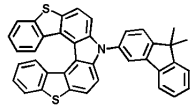
[0091]



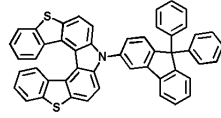
[0092]



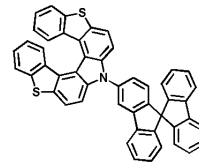
4-9



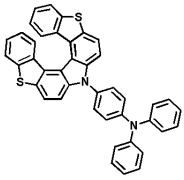
4-10



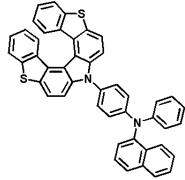
4-11



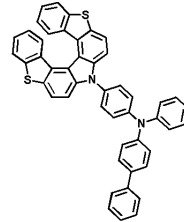
4-12



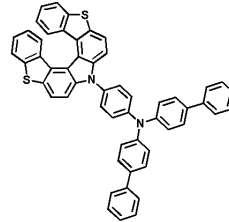
4-13



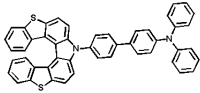
4-14



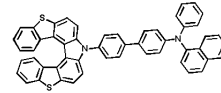
4-15



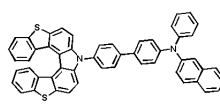
4-16



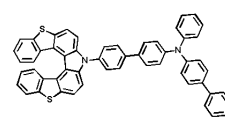
4-17



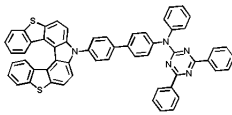
4-18



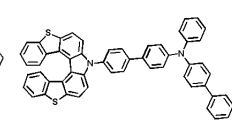
4-19



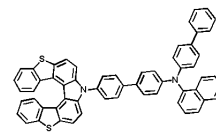
4-20



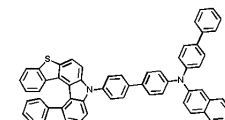
4-21



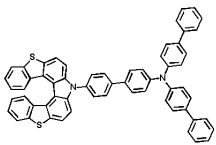
4-22



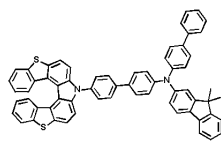
4-23



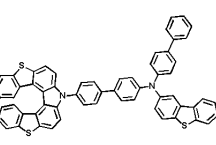
4-24



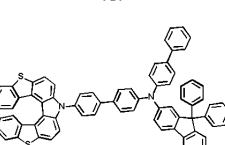
4-25



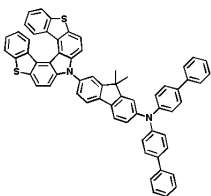
4-26



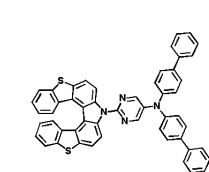
4-27



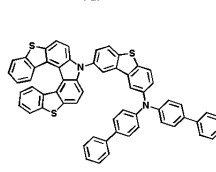
4-28



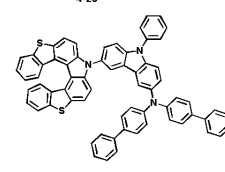
4-29



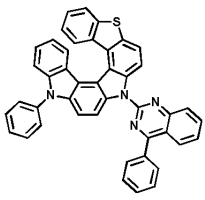
4-30



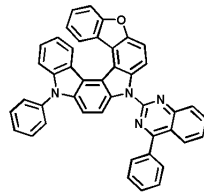
4-31



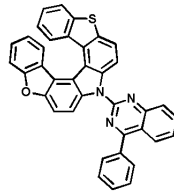
4-32



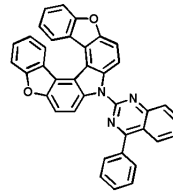
4-33



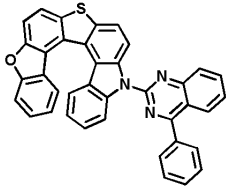
4-34



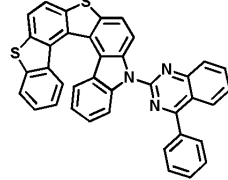
4-35



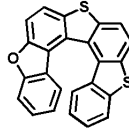
4-36



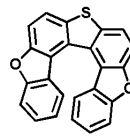
4-37



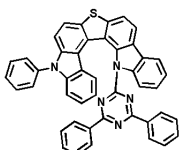
4-38



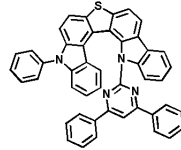
4-39



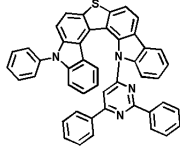
4-40



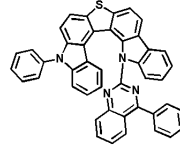
5-1



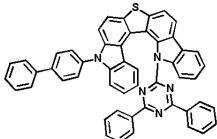
5-2



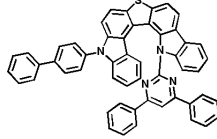
5-3



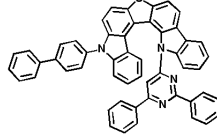
5-4



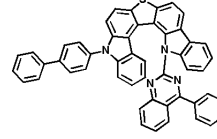
5-5



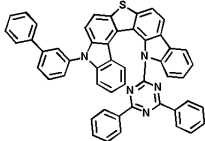
5-6



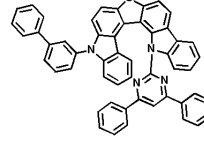
5-7



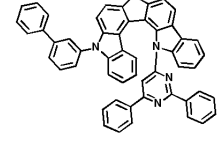
5-8



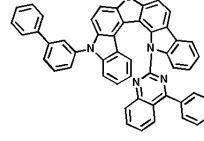
5-9



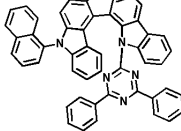
5-10



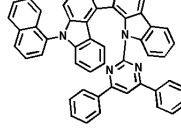
5-11



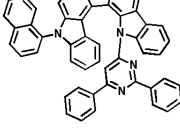
5-12



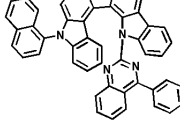
5-13



5-14

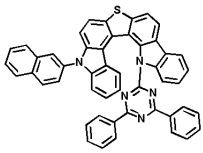


5-16

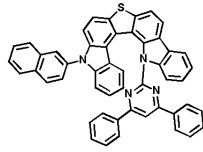


5-16

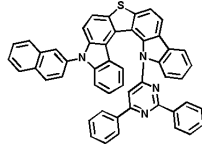
[0094]



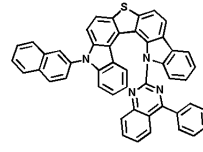
5-17



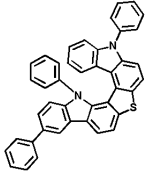
5-18



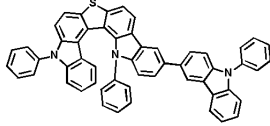
5-19



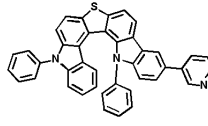
5-20



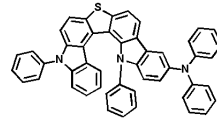
5-21



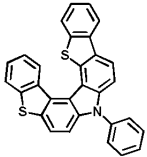
5-22



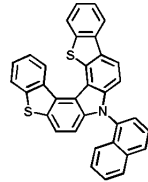
5-23



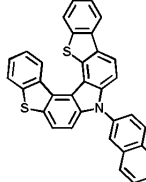
5-24



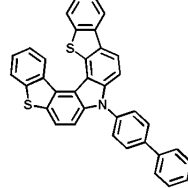
6-1



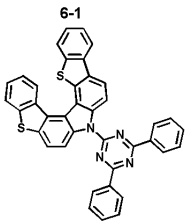
6-2



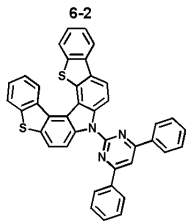
6-3



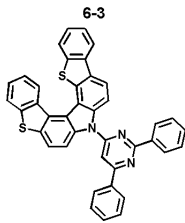
6-4



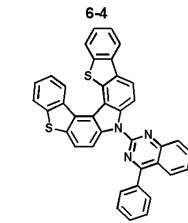
6-5



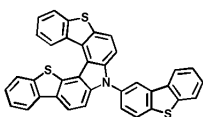
6-6



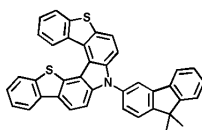
6-7



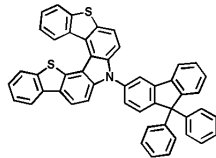
6-8



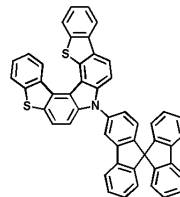
6-9



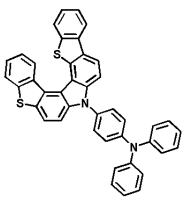
6-10



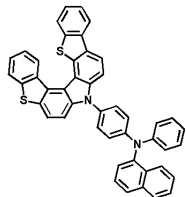
6-11



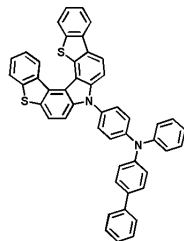
6-12



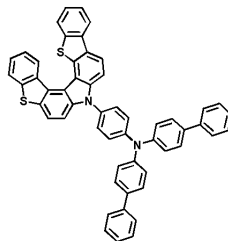
6-13



6-14

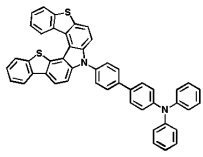


6-15

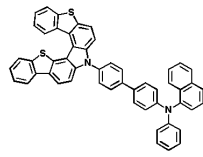


6-16

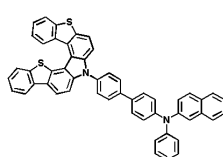
[0095]



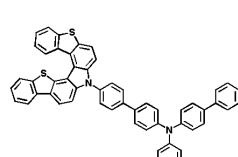
6-17



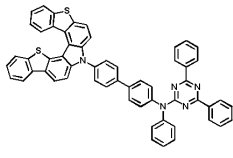
6-18



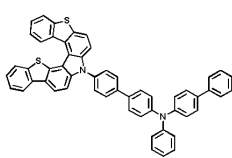
6-19



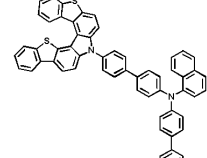
6-20



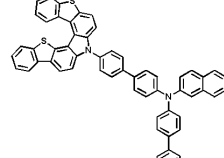
6-21



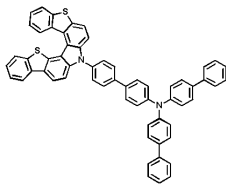
6-22



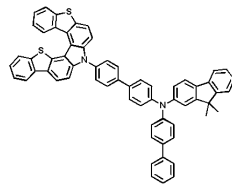
6-23



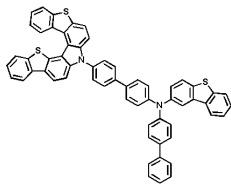
6-24



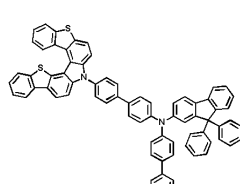
6-25



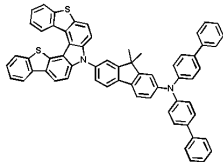
6-26



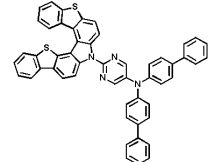
6-27



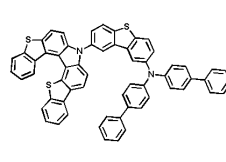
6-28



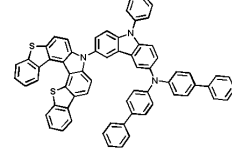
6-29



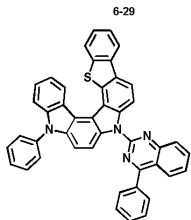
6-30



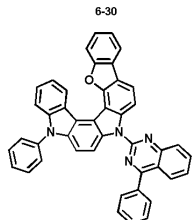
6-31



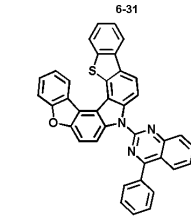
6-32



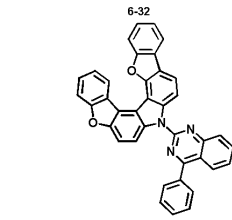
6-33



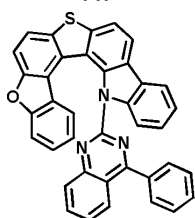
6-34



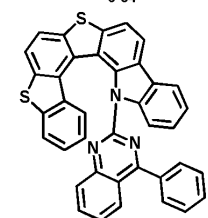
6-35



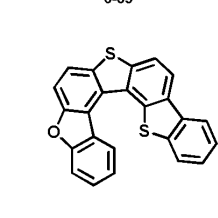
6-36



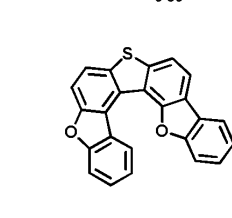
6-37



6-38

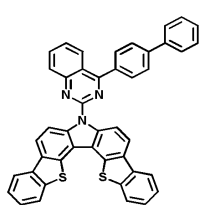


6-39

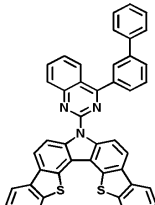


6-40

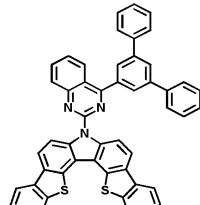
[0096]



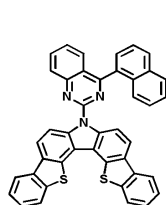
7-1



7-2

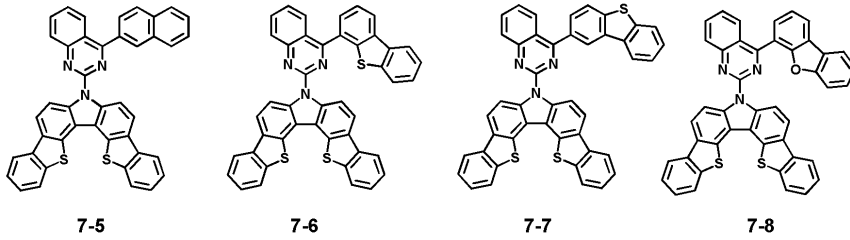


7-3

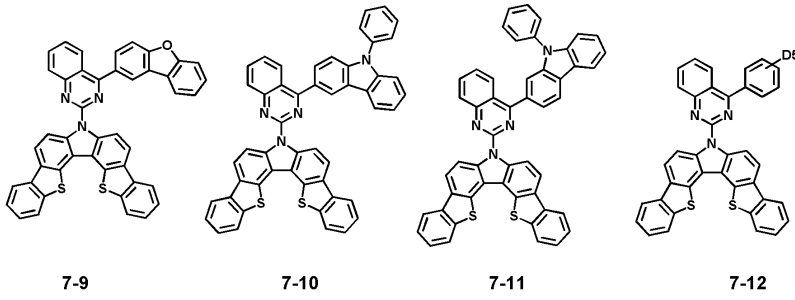


7-4

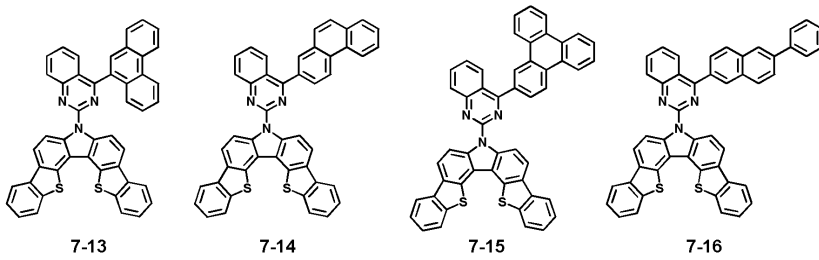
[0097]



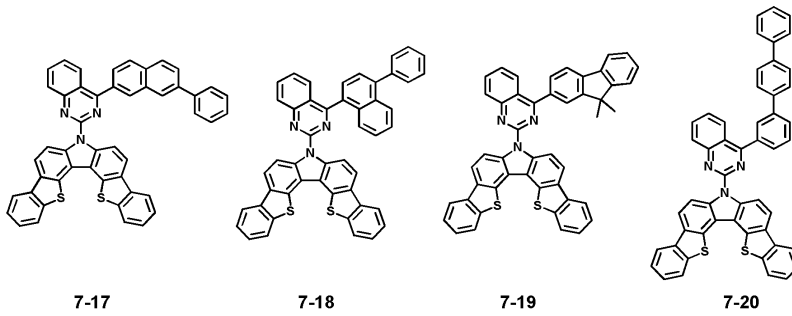
[0098]



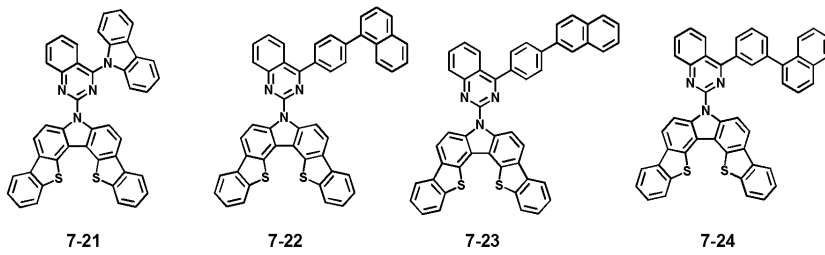
[0099]



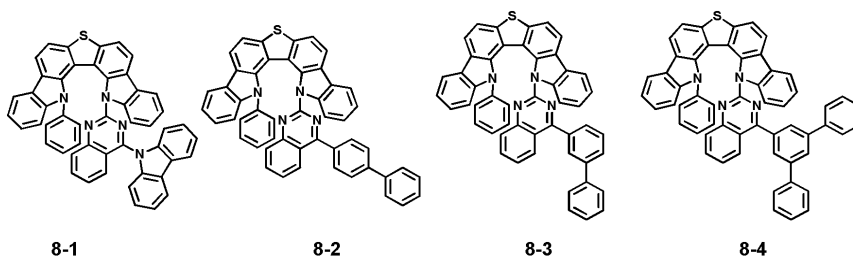
[0100]



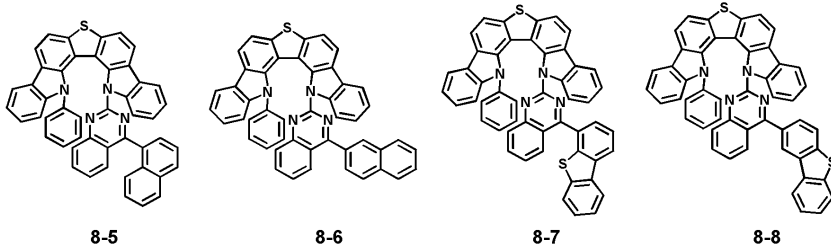
[0101]



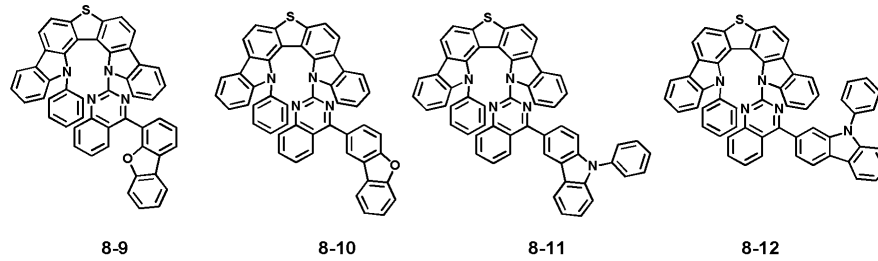
[0102]



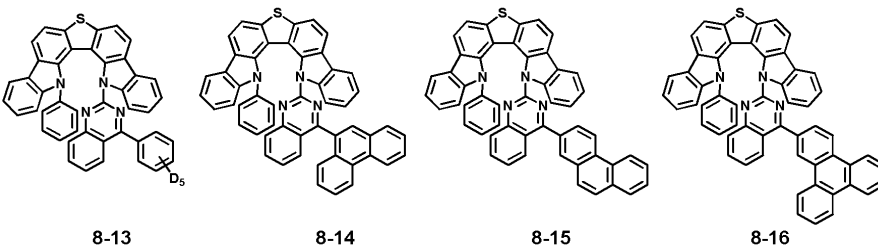
[0103]



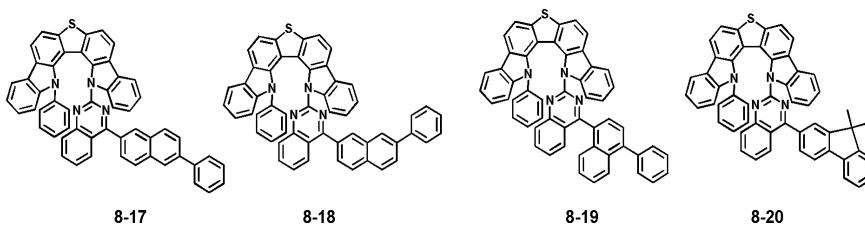
[0104]



[0105]



[0106]



[0107]

[0108]

[0109]

[0110]

다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1은 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있을 것이다. 즉, 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층의 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 유기물층에 상기 화학식 2 내지 화학식 3으로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 보다 구체적으로, 본 발명은 상기 유기물층에 상기 개별 화학식으로 표시되는 화합물 1-1 내지 1-24, 2-1 내지 2-40, 3-1 내지 3-24, 4-1 내지 4-40, 5-1 내지 5-24, 6-1 내지 6-40, 7-1 내지 1-24 및 8-1 내지 8-20을 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 또한, 상기 유기물층에 함유된 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 1종 단독 또는 2 이상의 혼합물일 수 있다. 예컨대, 유기물층 중 발광보조층이나 발광층은 1-1 화합물 단독으로 형성될 수도 있고, 1-1과 3-1의 혼합물을 포함할 수도 있다.

[0111]

본 발명의 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0112]

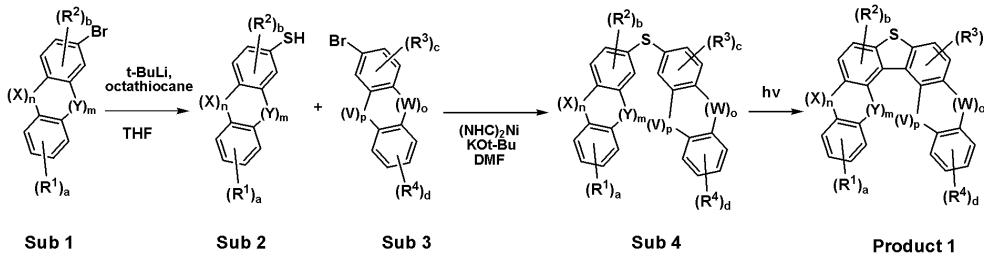
이하에서, 본 발명에 따른 화학식으로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0113] **합성예**

[0114] 예시적으로 본 발명에 따른 화합물은 Z에 따라 하기 반응식 1 또는 반응식 3과 같은 반응에 의해 제조될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0115] **I. Product 1의 합성예(Z=S)**

[0116] <반응식 1>

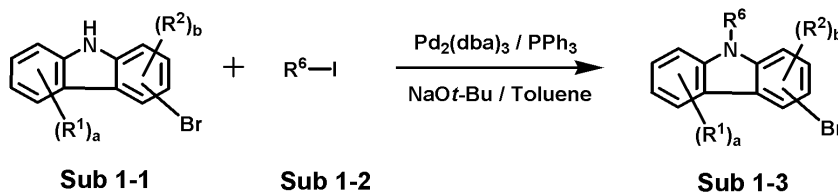


[0117]

[0118] **1. Sub 1의 합성예**

[0119] Sub 1에서 X 또는 Y가 NR⁶일 경우는 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

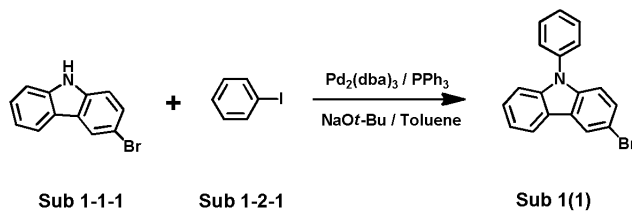
[0120] <반응식 2>



[0121]

[0122] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1 (1당량), Sub 1-2 (1당량), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량), toluene (10.5mL / Sub1-1 1mmol)을 넣은 후에 100℃에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-3을 얻었다.

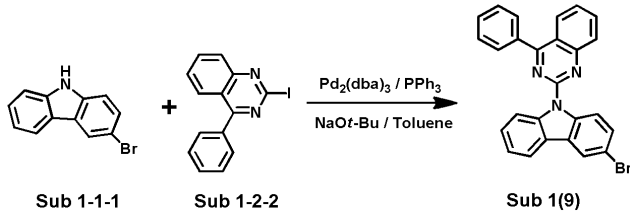
[0123] **(1) Sub 1(1)의 합성예**



[0124]

[0125] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-1 (4.9g, 20mmol), Sub 1-2-1 (4.1g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100℃에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1(1)을 4.8g (수율: 75%) 얻었다.

[0126] (2) Sub 1(9)의 합성에

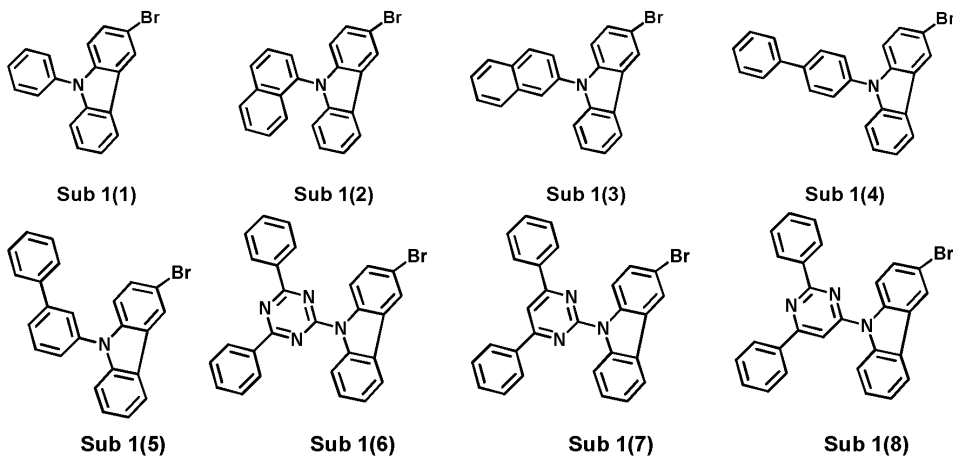


[0127]

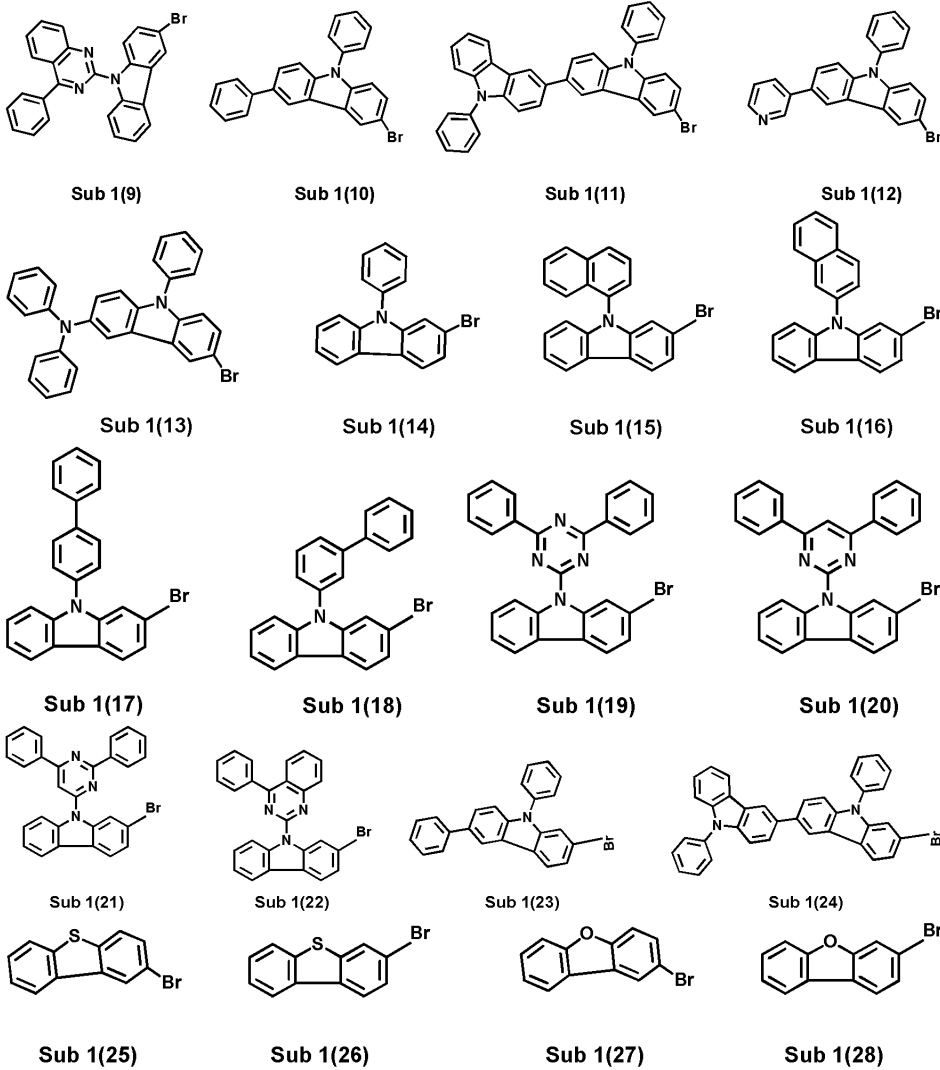
[0128] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-1 (4.9g, 20mmol), Sub 1-2-2 (6.6g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100℃에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1(9)를 6.2g (수율: 69%) 얻었다.

[0129]

한편, Sub 1의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 하기 표 1과 같다.



[0130]



[0131]

[0132]

[표 1]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1(1)	m/z=321.02(C ₁₈ H ₁₂ BrN=322.20)	Sub 1(2)	m/z=371.03(C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)
Sub 1(3)	m/z=371.03(C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)	Sub 1(4)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)
Sub 1(5)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)	Sub 1(6)	m/z=476.06(C ₂₇ H ₁₇ BrN ₄ =477.35)
Sub 1(7)	m/z=475.07(C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)	Sub 1(8)	m/z=475.07(C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)
Sub 1(9)	m/z=449.05(C ₂₆ H ₁₆ BrN ₃ =450.33)	Sub 1(10)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)
Sub 1(11)	m/z=562.10(C ₃₆ H ₂₃ BrN ₂ =563.49)	Sub 1(12)	m/z=398.04(C ₂₃ H ₁₅ BrN ₂ =399.28)
Sub 1(13)	m/z=488.09(C ₃₀ H ₂₁ BrN ₂ =489.41)	Sub 1(14)	m/z=321.02(C ₁₈ H ₁₂ BrN=322.20)
Sub 1(15)	m/z=371.03(C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)	Sub 1(16)	m/z=371.03(C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)
Sub 1(17)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)	Sub 1(18)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)
Sub 1(19)	m/z=476.06(C ₂₇ H ₁₇ BrN ₄ =477.35)	Sub 1(20)	m/z=475.07(C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)
Sub 1(21)	m/z=475.07(C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)	Sub 1(22)	m/z=449.05(C ₂₆ H ₁₆ BrN ₃ =450.33)
Sub 1(23)	m/z=397.05(C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)	Sub 1(24)	m/z=562.10(C ₃₆ H ₂₃ BrN ₂ =563.49)
Sub 1(25)	m/z=261.95(C ₁₂ H ₇ BrS=263.15)	Sub 1(26)	m/z=261.95(C ₁₂ H ₇ BrS=263.15)
Sub 1(27)	m/z=245.97(C ₁₂ H ₇ BrO=247.09)	Sub 1(28)	m/z=245.97(C ₁₂ H ₇ BrO=247.09)

[0133]

[0134] 2. Sub 2의 합성예

[0135] Sub 1 (1당량)에 *tert*-butyl lithium (1.1당량)을 넣고 -78℃에서 1시간 동안 교반한다. 그 후 상온으로 올린 뒤, octathiocane (1.5당량)을 넣고 3시간 동안 교반한다. 그 후에 HCl을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 2를 얻었다.

[0136] 3. Sub 3의 합성예

[0137] Sub 3은 상기 Sub 1의 예시와 동일하나 이에 한정되는 것은 아니다.

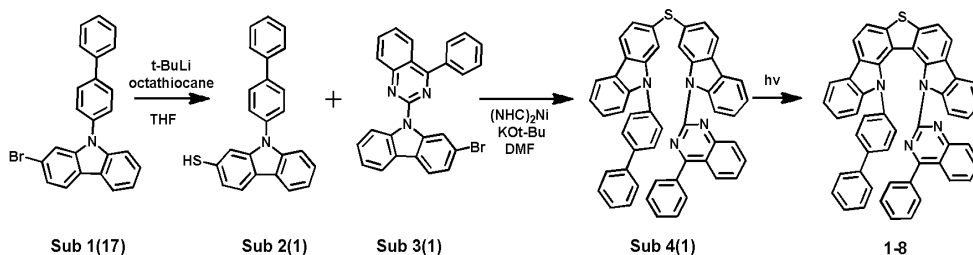
[0138] 4. Sub 4의 합성예

[0139] Sub 2 (1당량)와 Sub 3 (1당량), potassium *tert*-butoxide (1.1당량), (NHC)₂Ni (0.04당량)을 DMF에 녹이고 난 후, 16시간 동안 110℃에서 교반하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 원하는 Sub 4를 얻었다.

[0140] 5. 최종생성물 1(Product 1)의 합성예

[0141] 1450W medium pressure Hg lamp가 있는 Hanovia 광 반응기에 Sub 4 (1당량), I₂ (1.25당량), cyclohexane을 넣고 20분간 아르곤(argon)과 함께 교반한다. 그 후 propylene oxide (6당량)를 넣고 30분간 광조사하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 최종생성물 1을 얻었다.

[0142] (1) 1-8의 합성예



[0143] 1) Sub 2(1)의 합성

[0144] Sub 1(17) (8.0g, 20mmol)에 *tert*-butyl lithium (1.4g, 22mmol)을 넣고 -78℃에서 1시간 동안 교반한다. 그 후 상온으로 올린 뒤, octathiocane(7.7g, 30mmol)을 넣고 3시간 동안 교반한다. 그 후에 HCl을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 2(1)을 4.6g (수율:65%) 얻었다.

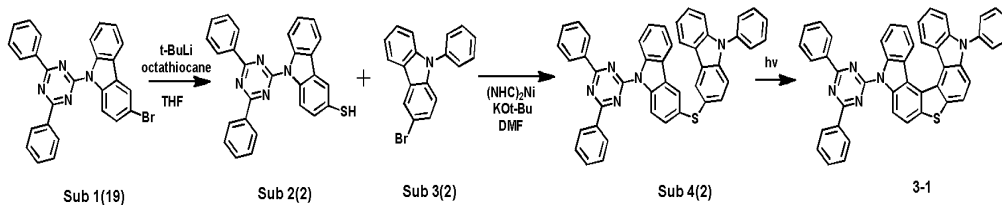
[0145] 2) Sub 4(1)의 합성

[0147] Sub 2(1) (7.0g, 20mmol)과 Sub 3(1) (9.0g, 20mmol), potassium *tert*-butoxide (2.5g, 22mmol), (NHC)₂Ni (0.67g, 0.8mmol)을 DMF에 녹이고 난 후, 16시간 동안 110℃에서 교반하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Sub 4(1)을 9.8g (수율: 68%) 얻었다.

[0148] 3) 1-8의 합성

[0149] 1450W medium pressure Hg lamp가 있는 Hanovia 광 반응기에 Sub 4(1) (14.4g, 20mmol), I₂ (6.34g, 25mmol), cyclohexane을 넣고 20분간 아르곤(argon)과 함께 교반한다. 그 후 propylene oxide (7.0g, 120mmol)를 넣고 30분간 광조사하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Product 1-8을 9.3g (수율: 65%) 얻었다.

[0150] (2) 3-1의 합성예



[0151]

[0152] 1) Sub 2(2)의 합성

[0153] Sub 1(19) (9.5g, 20mmol)에 *tert*-butyl lithium (1.4g, 22mmol)을 넣고 -78℃에서 1시간 동안 교반한다. 그 후 상온으로 올린 뒤, octathiocane (7.7g, 30mmol)을 넣고 3시간 동안 교반한다. 그 후에 HCl을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 2(2)를 5.8g (수율: 67%) 얻었다.

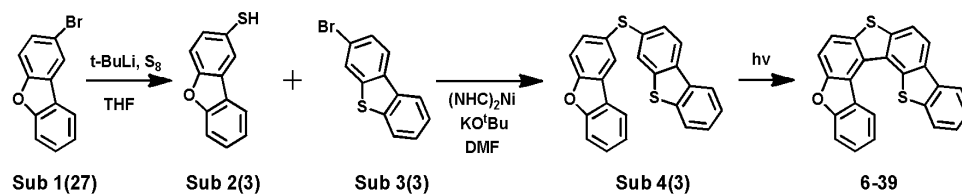
[0154] 2) Sub 4(2)의 합성

[0155] Sub 2(2) (8.6g, 20mmol)와 Sub 3(2) (6.4g, 20mmol), potassium *tert*-butoxide (2.5g, 22mmol), (NHC)₂Ni (0.67g, 0.8mmol)을 DMF에 녹이고 난 후, 16시간 동안 110℃에서 교반하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Sub 4(2)를 9.4g (수율: 70%) 얻었다.

[0156] 3) 3-1의 합성

[0157] 1450W medium pressure Hg lamp가 있는 Hanovia 광 반응기에 Sub 4(2) (13.4g, 20mmol), I₂ (6.34g, 25mmol), cyclohexane을 넣고 20분간 아르곤(argon)과 함께 교반한다. 그 후 propylene oxide (7.0g, 120mmol)를 넣고 30분간 광조사하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Product 3-1을 8.7g (수율: 65%) 얻었다.

[0158] (3) 6-39의 합성예



[0159]

[0160] 1) Sub 2(3)의 합성

[0161] Sub 1(27) (4.9g, 20mmol)에 *tert*-butyl lithium (1.4g, 22mmol)을 넣고 -78℃에서 1시간 동안 교반한다. 그 후 상온으로 올린 뒤, octathiocane(7.7g, 30mmol)을 넣고 3시간 동안 교반한다. 그 후에 HCl을 넣고 30분 동안 교반한다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 2(3)을 2.5g (수율: 62%) 얻었다.

[0162] 2) Sub 4(3)의 합성

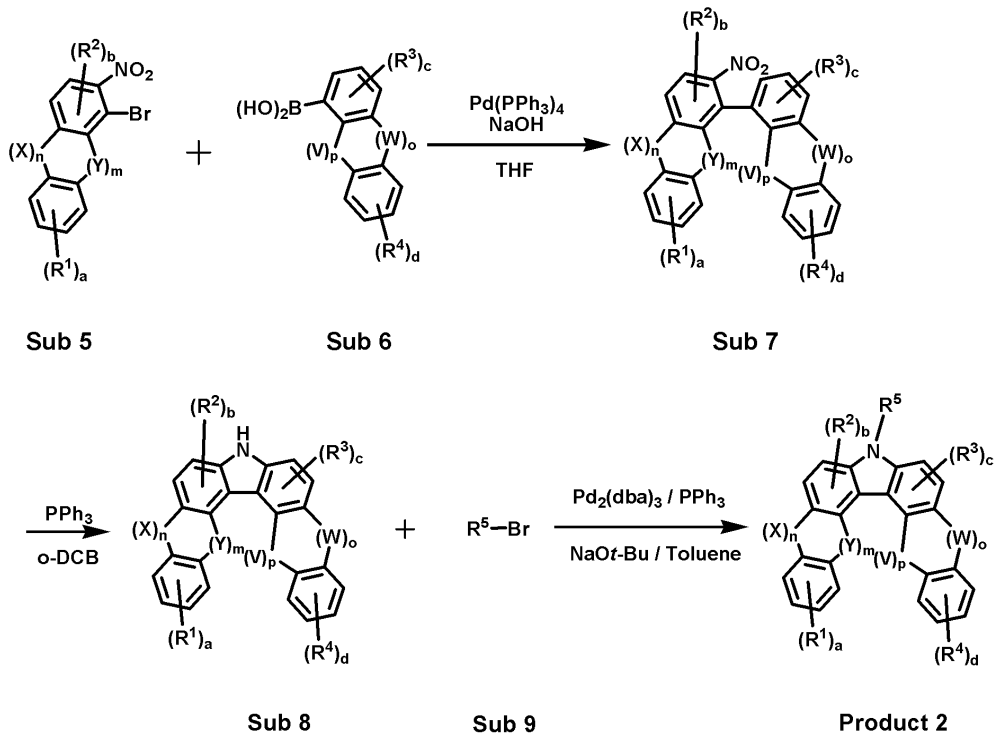
[0163] Sub 2(3) (4.0g, 20mmol)과 Sub 3(3) (5.3g, 20mmol), potassium tert-butoxide (2.5g, 22mmol), (NHC)₂Ni (0.67g, 0.8mmol)을 DMF에 녹이고 난 후, 16시간 동안 110℃에서 교반하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Sub 4(3)을 5.0g (수율: 66%) 얻었다.

[0164] 3) 6-39의 합성

[0165] 1450W medium pressure Hg lamp가 있는 Hanovia 광 반응기에 Sub 4(3) (7.7g, 20mmol), I₂ (6.34g, 25mmol), cyclohexane을 넣고 20분간 아르곤(argon)과 함께 교반한다. 그 후 propylene oxide (7.0g, 120mmol)를 넣고 30분간 광조사하였다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피로 분리하여 원하는 Product6-39를 4.6g (수율: 61%) 얻었다.

[0166] II. Product 2의 합성예(Z=NR⁵)

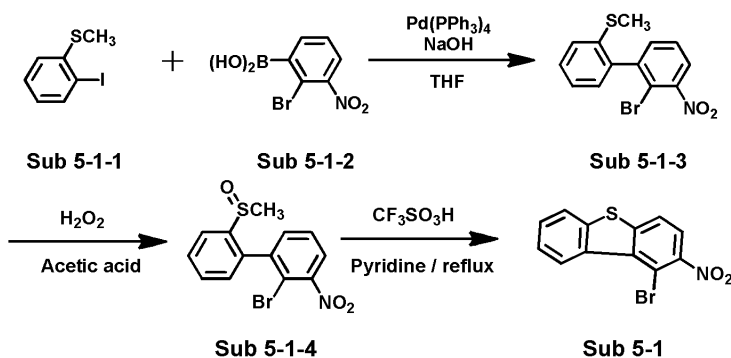
[0167] <반응식 3>



[0168]

[0169] 1. Sub 5의 합성예

[0170] (1) Sub 5-1의 합성예



[0171]

[0172] 1) Sub 5-1-3 합성

[0173] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-1-1 (5.0g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-1-2 (4.9g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-1-3을 3.9g (수율: 60%) 얻었다.

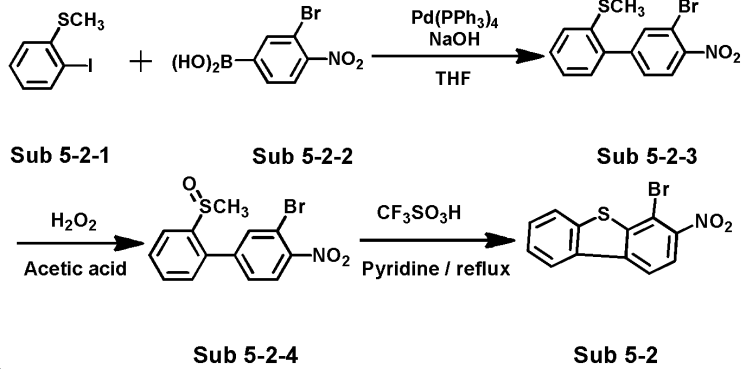
[0174] 2) Sub 5-1-4 합성

[0175] Sub 5-1-3 (6.5g, 20mmol)을 아세트산(acetic acid)에 녹이고 과산화수소(hydrogen peroxide)를 아세트산(acetic acid)에 용해시킨 것을 한 방울씩 떨어뜨리며(dropwise) 상온에서 6시간 교반한다. 반응이 종결되면 감압장치를 이용하여 아세트산(acetic acid)을 제거하고 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-1-4를 4.6g (수율: 68%) 얻었다.

[0176] 3) Sub 5-1의 합성

[0177] Sub 5-1-4 (6.8g, 20mmol)를 과량의 트리플루오로메탄술포산(trifluoromethanesulfonic acid)에 넣고 상온에서 24시간 교반한 다음 물과 피리딘(8:1)을 천천히 넣고 30분 환류한다. 온도를 내리고 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아준다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-1을 4.1g (수율:67%) 얻었다.

[0178] (2) Sub 5-2의 합성에



[0179] 1) Sub 5-2-3 합성

[0180] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-2-1 (5.0g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-2-2 (4.9g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-2-3을 4.0g (수율: 62%) 얻었다.

[0182] 2) Sub 5-2-4 합성

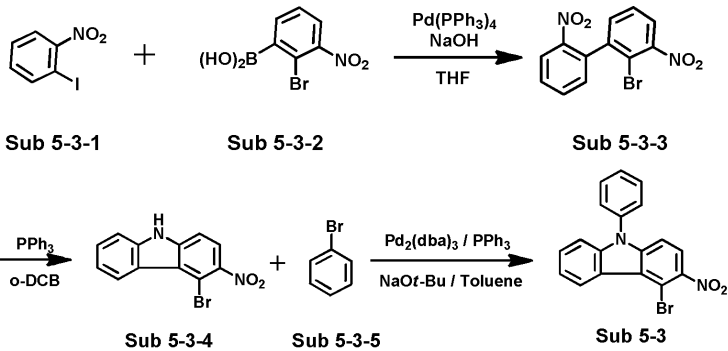
[0183] Sub 5-2-3 (6.5g, 20mmol)을 아세트산(acetic acid)에 녹이고 과산화수소(hydrogen peroxide)를 아세트산(acetic acid)에 용해시킨 것을 한 방울씩 떨어뜨리며(dropwise) 상온에서 6시간 교반한다. 반응이 종결되면 감압장치를 이용하여 아세트산(acetic acid)을 제거하고 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-2-4를 4.8g (수율: 70%) 얻었다.

[0184] 3) Sub 5-2의 합성

[0185] Sub 5-2-4 (6.8g, 20mmol)를 과량의 트리플루오로메탄술포산(trifluoromethanesulfonic acid)에 넣고 상온에서 24시간 교반한 다음 물과 피리딘(8:1)을 천천히 넣고 30분 환류한다. 온도를 내리고 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아준다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그

래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-2를 4.4g (수율: 72%) 얻었다.

[0186] (3) Sub 5-3의 합성에



[0187]

[0188] 1) Sub 5-3-3 합성

[0189] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-3-1 (5.0g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-3-2 (4.9g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-3-3을 4.3g (수율: 66%) 얻었다.

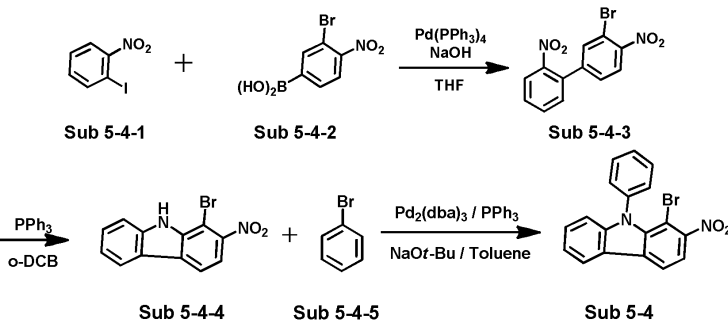
[0190] 2) Sub 5-3-4 합성

[0191] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-3-3 (6.5g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-3-4을 4.1g (수율: 70%) 얻었다.

[0192] 3) Sub 5-3의 합성

[0193] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-3-4 (5.8g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-3-5 (3.1g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100℃에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-3을 5.4g (수율: 74%) 얻었다.

[0194] (4) Sub 5-4의 합성에



[0195]

[0196] 1) Sub 5-4-3 합성

[0197] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-4-1 (5.0g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-4-2 (4.9g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-4-3을 4.3g (수율: 67%) 얻었다.

[0198] 2) Sub 5-4-4 합성

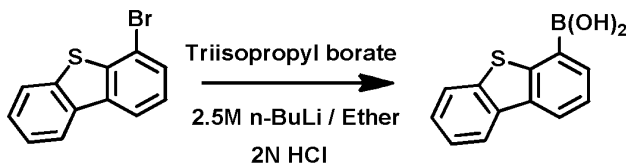
[0199] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-4-3 (6.5g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 5-3-4를 4.0g (수율: 69%) 얻었다.

[0200] 3) Sub 5-4의 합성

[0201] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-4-4 (5.8g, 20mmol)을 넣고, Sub 5-4-5 (3.1g, 20mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.9g, 1mmol), PPh_3 (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100°C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 5-4를 5.5g (수율: 75%) 얻었다.

[0202] 2. Sub 6의 합성에

[0203] (1) Sub 6-1의 합성에



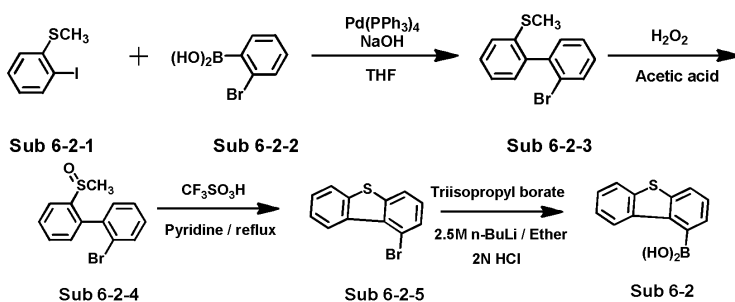
Sub 6-1-1

Sub 6-1

[0204]

[0205] Sub 6-1-1 (5.4g, 20mmol)을 무수 Ether에 녹이고, 반응물의 온도를 -78°C로 낮추고, n-BuLi (2.5M in hexane) (1.4g, 22mmol)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 30분 동안 교반시켰다. 그 후 다시 반응물의 온도를 -78°C로 낮추고 Triisopropyl borate (5.6g, 30mmol)를 적가하였다. 상온에서 교반한 뒤 물을 넣어 희석시키고 2N HCl을 넣어준다. 반응이 완료되면 ethyl acetate와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-1을 3.3g (수율: 73%) 얻었다.

[0206] (2) Sub 6-2의 합성에



[0207]

[0208] 1) Sub 6-2-3 합성

[0209] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-2-1 (5.0g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-2-2 (4.0g, 20mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO_4 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-2-3을 3.8g (수율: 68%) 얻었다.

[0210] 2) Sub 6-2-4 합성

[0211] Sub 6-2-3 (5.6g, 20mmol)을 아세트산(acetic acid)에 녹이고 과산화수소(hydrogen peroxide)를 아세트산(acetic acid)에 용해시킨 것을 한 방울씩 떨어뜨리며(dropwise) 상온에서 6시간 교반한다. 반응이 종결되면 감압장치를 이용하여 아세트산(acetic acid)을 제거하고 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 6-

2-4를 4.3g (수율: 72%) 얻었다.

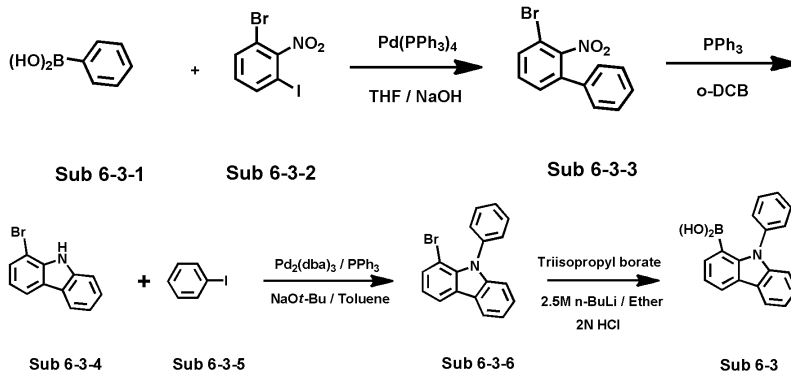
[0212] 3) Sub 6-2-5 합성

[0213] Sub 6-2-4 (5.9g, 20mmol)를 과량의 트리플루오로메탄술폰산(trifluoromethanesulfonic acid)에 넣고 상온에서 24시간 교반한 다음 물과 피리딘(8:1)을 천천히 넣고 30분 환류한다. 온도를 내리고 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아준다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 6-2-5를 3.8g (수율: 73%) 얻었다.

[0214] 4) Sub 6-2의 합성

[0215] Sub 6-2-5 (5.3g, 20mmol)를 무수 Ether에 녹이고, 반응물의 온도를 -78℃로 낮추고, n-BuLi (2.5M in hexane) (1.4g, 22mmol)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 30분 동안 교반시켰다. 그 후 다시 반응물의 온도를 -78℃로 낮추고 Triisopropyl borate (5.6g, 30mmol)를 적가하였다. 상온에서 교반한 뒤 물을 넣어 희석시키고 2N HCl을 넣어준다. 반응이 완료되면 ethyl acetate와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-2를 3.4g (수율: 75%) 얻었다.

[0216] (3) Sub 6-3의 합성에



[0217]

[0218] 1) Sub 6-3-3 합성

[0219] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-3-1 (2.4g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-3-2 (6.6g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃-90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-3-3을 3.1g (수율: 55%) 얻었다.

[0220] 2) Sub 6-3-4 합성

[0221] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-3-3 (5.6g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 6-3-4를 2.8g (수율: 58%) 얻었다.

[0222] 3) Sub 6-3-6 합성

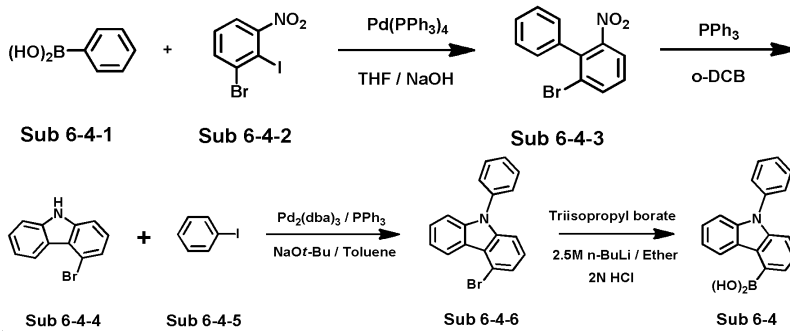
[0223] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-3-4 (4.9g, 20mmol), Sub 6-3-5 (4.1g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100℃에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-3-6을 4.6g (수율: 73%) 얻었다.

[0224] *4) Sub 6-3의 합성

[0225] Sub 6-3-6 (6.4g, 20mmol)을 무수 Ether에 녹이고, 반응물의 온도를 -78℃로 낮추고, n-BuLi (2.5M in hexane) (1.4g, 22mmol)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 30분 동안 교반시켰다. 그 후 다시 반응물의 온도를 -78℃

로 낮추고 Triisopropyl borate (5.6g, 30mmol)를 적가하였다. 상온에서 교반한 뒤 물을 넣어 희석시키고 2N HCl을 넣어준다. 반응이 완료되면 ethyl acetate와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-3을 3.8g (수율: 68%) 얻었다.

[0226] (4) Sub 6-4의 합성에



[0227]

[0228] 1) Sub 6-4-3 합성

[0229] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-4-1 (2.4g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-4-2 (6.6g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-4-3을 3.1g (수율: 56%) 얻었다.

[0230] 2) Sub 6-4-4 합성

[0231] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-4-3 (5.6g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 6-4-4를 3.0g (수율: 60%) 얻었다.

[0232] 3) Sub 6-4-6 합성

[0233] 둥근바닥플라스크에 Sub 6-4-4 (4.9g, 20mmol), Sub 6-4-5 (4.1g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 넣은 후에 100°C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-4-6을 4.8g (수율: 75%) 얻었다.

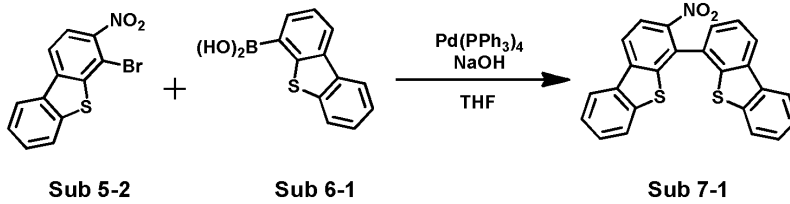
[0234] 4) Sub 6-4의 합성

[0235] Sub 6-4-6 (6.4g, 20mmol)을 무수 Ether에 녹이고, 반응물의 온도를 -78°C로 낮추고, n-BuLi (2.5M in hexane) (1.4g, 22mmol)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 30분 동안 교반시켰다. 그 후 다시 반응물의 온도를 -78°C로 낮추고 Triisopropyl borate (5.6g, 30mmol)를 적가하였다. 상온에서 교반한 뒤 물을 넣어 희석시키고 2N HCl을 넣어준다. 반응이 완료되면 ethyl acetate와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 6-4를 4.1g (수율: 71%) 얻었다.

[0236] 3. Sub 7의 합성에

[0237] 둥근바닥플라스크에 Sub 5 (1당량)을 넣고, Sub 6 (1당량), Pd(PPh₃)₄ (0.03당량), NaOH (3당량), THF, 물을 넣는다. 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 7을 얻었다.

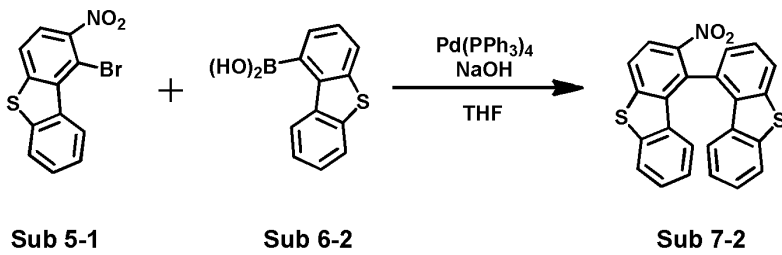
[0238] (1) Sub 7-1의 합성에



[0239]

[0240] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-2 (6.2g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-1 (4.6g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 7-1을 5.8g (수율: 71%) 얻었다.

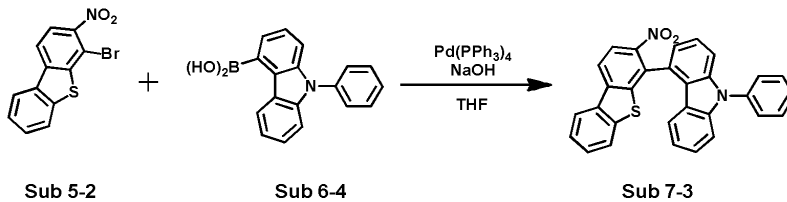
[0241] (2) Sub 7-2의 합성에



[0242]

[0243] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-1 (6.2g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-2 (4.6g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 7-2을 5.7g (수율: 69%) 얻었다.

[0244] (3) Sub 7-3의 합성에



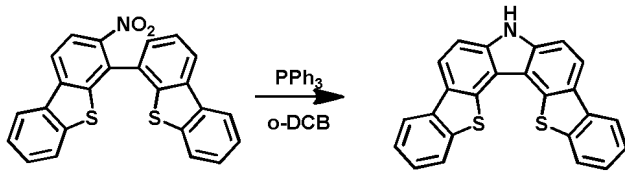
[0245]

[0246] 둥근바닥플라스크에 Sub 5-2 (6.2g, 20mmol)을 넣고, Sub 6-4 (5.7g, 20mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6mmol), NaOH (2.4g, 60mmol), THF (60mL), 물 (30mL)을 넣는다. 그런 후에 80℃~90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 7-3을 6.2g (수율: 66%) 얻었다.

[0247] 4. Sub 8의 합성에

[0248] 둥근바닥플라스크에 Sub 7 (1당량)과 triphenylphosphine (3당량)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 8을 얻었다.

[0249] (1) Sub 8-1의 합성예



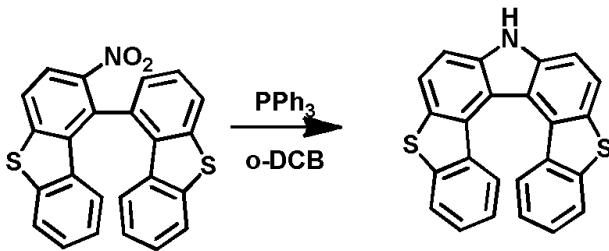
Sub 7-1

Sub 8-1

[0250]

[0251] 둥근바닥플라스크에 Sub 7-1 (8.2g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 8-1을 5.2g (수율: 68%) 얻었다.

[0252] (2) Sub 8-2의 합성예



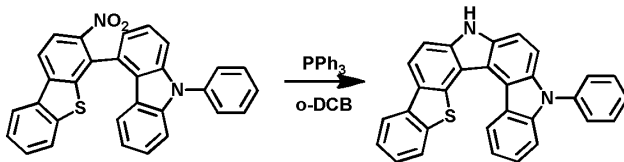
Sub 7-2

Sub 8-2

[0253]

[0254] 둥근바닥플라스크에 Sub 7-2 (8.2g, 20mmol)와 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 8-2를 5.1g (수율: 67%) 얻었다.

[0255] (3) Sub 8-3의 합성예



Sub 7-3

Sub 8-3

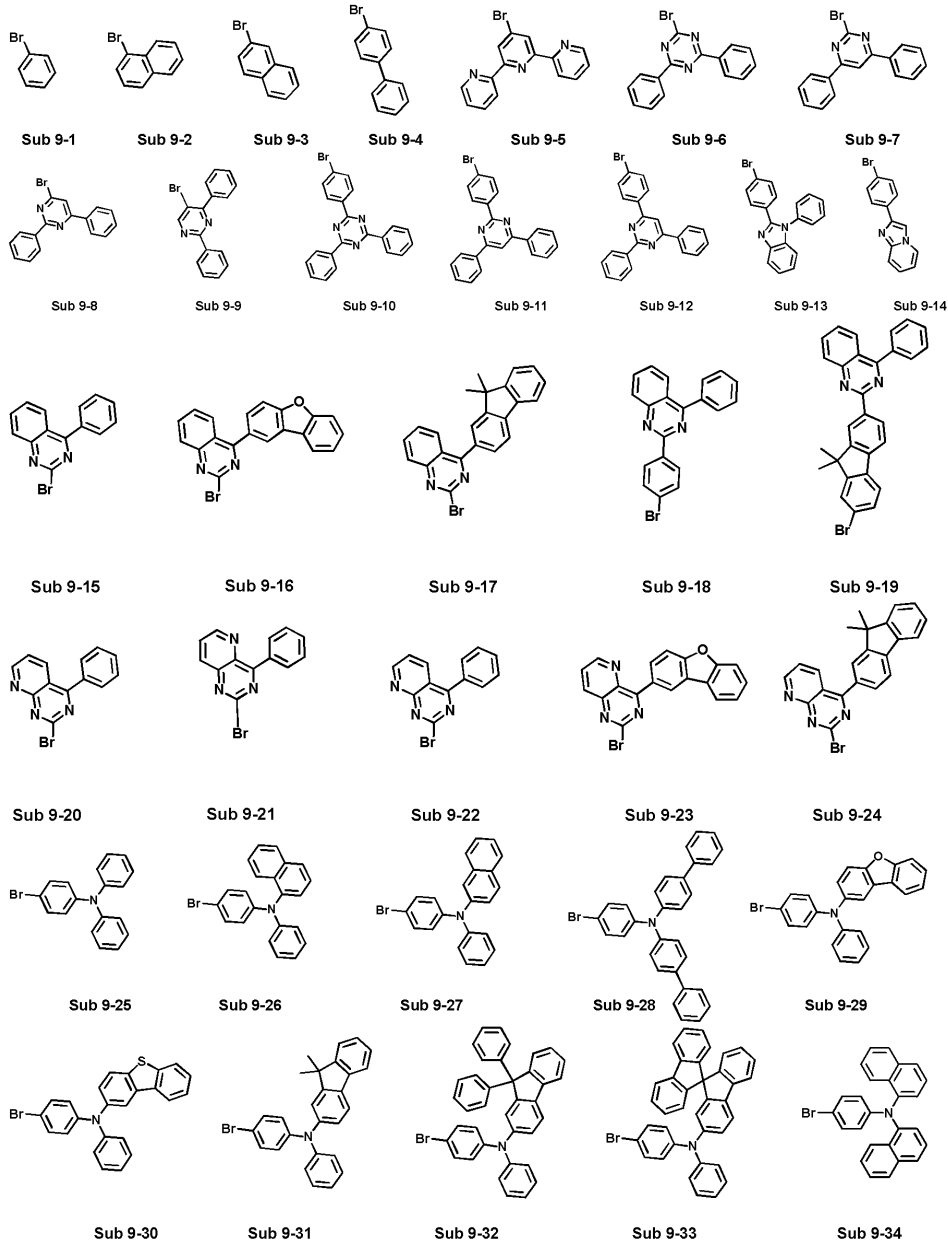
[0256]

[0257] 둥근바닥플라스크에 Sub 7-3 (9.4g, 20mmol)과 triphenylphosphine (15.7g, 60mmol)을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 8-3을 5.7g (수율: 65%) 얻었다.

[0258] 5. Sub 9의 예시

[0259]

Sub 9의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 표 2와 같다.



[0260]

[0261] [표 2]

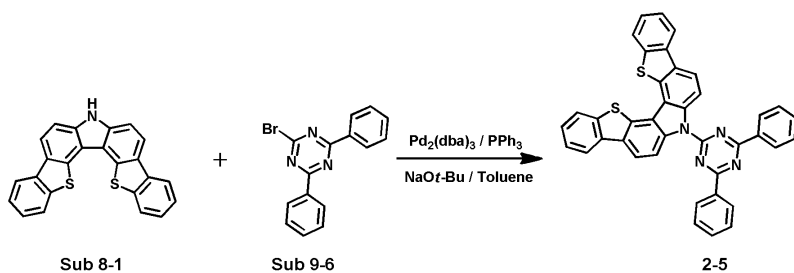
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 9-1	m/z=155.96(C ₆ H ₅ Br =157.01)	Sub9-2	m/z=205.97(C ₁₀ H ₇ Br =207.07)
Sub 9-3	m/z=205.97(C ₁₀ H ₇ Br =207.07)	Sub9-4	m/z=231.99(C ₁₂ H ₉ Br =233.10)
Sub 9-5	m/z=309.02(C ₁₇ H ₁₂ BrN =310.19)	Sub9-6	m/z=311.01(C ₁₅ H ₁₀ BrN ₃ =312.16)
Sub 9-7	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub9-8	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)
Sub9-9	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub9-10	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.26)
Sub9-11	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)	Sub9-12	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)
Sub9-13	m/z=348.03(C ₁₉ H ₁₃ BrN ₂ =349.22)	Sub9-14	m/z=271.99(C ₁₃ H ₉ BrN ₂ =273.13)
Sub 9-15	m/z=283.99(C ₁₄ H ₉ BrN ₂ =285.14)	Sub 9-16	m/z=374.01(C ₂₀ H ₁₁ BrN ₂ O=375.22)
Sub 9-17	m/z=400.06(C ₂₃ H ₁₇ BrN ₂ =401.30)	Sub 9-18	m/z=360.03(C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)
Sub 9-19	m/z=476.09(C ₂₉ H ₂₁ BrN ₂ =477.39)	Sub 9-20	m/z=284.99(C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)
Sub 9-21	m/z=284.99(C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)	Sub 9-22	m/z=284.99(C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)
Sub 9-23	m/z=375.00(C ₁₉ H ₁₀ BrN ₃ O=376.2)	Sub 9-24	m/z=401.05(C ₂₂ H ₁₆ BrN ₃ =402.29)
Sub 9-25	m/z=323.03(C ₁₈ H ₁₄ BrN=324.21)	Sub 9-26	m/z=373.05(C ₂₂ H ₁₆ BrN=374.27)
Sub 9-27	m/z=373.05(C ₂₂ H ₁₆ BrN=374.27)	Sub 9-28	m/z=475.09(C ₃₀ H ₂₂ BrN=476.41)
Sub 9-29	m/z=413.04(C ₂₄ H ₁₆ BrNO=414.3)	Sub 9-30	m/z=429.02(C ₂₄ H ₁₆ BrNS=430.36)
Sub 9-31	m/z=439.09(C ₂₇ H ₂₂ BrN=440.37)	Sub 9-32	m/z=563.12(C ₃₇ H ₂₆ BrN=564.51)
Sub 9-33	m/z=561.11(C ₃₇ H ₂₄ BrN=562.50)	Sub 9-34	m/z=423.06(C ₂₆ H ₁₈ BrN=424.33)

[0262]

[0263] 6. 최종생성물 2(Product 2)의 합성예

[0264] 둥근바닥플라스크에 Sub 8 (1당량), Sub 9 (1당량), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), Na*o*-Bu (3당량), toluene (10.5ml / Sub 8 1mmol)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종생성물 2를 얻었다.

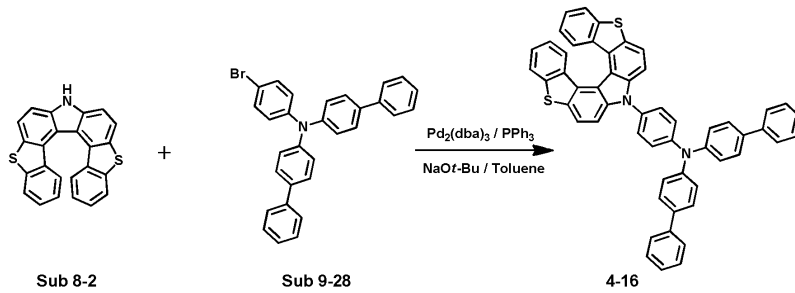
[0265] (1) 2-5의 합성예



[0266]

[0267] 둥근바닥플라스크에 Sub 8-1 (7.6g, 20mmol), Sub 9-6 (7.5g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), Na*o*-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210ml)을 각각 첨가한 뒤, 100°C에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 2-5를 8.8g (수율: 72%) 얻었다.

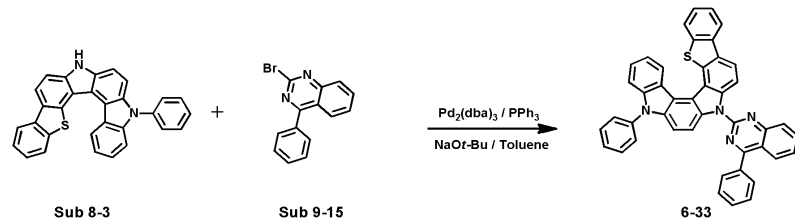
[0268] (2) 4-16의 합성예



[0269]

[0270] 둥근바닥플라스크에 Sub 8-2 (7.6g, 20mmol), Sub 9-28 (11.4g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 4-16을 10.8g (수율: 70%) 얻었다.

[0271] (3) 6-33의 합성예



[0272]

[0273] 둥근바닥플라스크에 Sub 8-3 (8.8g, 20mmol), Sub 9-15 6.8g, 20mmol), Pd₂(dba)₃ (0.9g, 1mmol), PPh₃ (0.5g, 2mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60mmol), toluene (210mL)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반환류 시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 6-33을 8.9g (수율: 69%) 얻었다.

[0274]

[표 3]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1	m/z=669.20(C ₄₅ H ₂₇ N ₅ S=669.79)	1-2	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)
1-3	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)	1-4	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)
1-5	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	1-6	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
1-7	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	1-8	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
1-9	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	1-10	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
1-11	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	1-12	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
1-13	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	1-14	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
1-15	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	1-16	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
1-17	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	1-18	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
1-19	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	1-20	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
1-21	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)	1-22	m/z=755.24(C ₅₄ H ₃₃ N ₃ S=755.92)
1-23	m/z=591.18(C ₄₁ H ₂₅ N ₃ S=591.72)	1-24	m/z=681.22(C ₄₈ H ₃₁ N ₃ S=681.84)
2-1	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	2-2	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ S=777.95)
2-3	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	2-4	m/z=531.11(C ₃₆ H ₂₁ NS ₂ =531.69)
2-5	m/z=610.13(C ₃₉ H ₂₃ N ₄ S ₂ =610.75)	2-6	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)
2-7	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)	2-8	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
2-9	m/z=561.07(C ₃₆ H ₁₉ NS ₃ =561.74)	2-10	m/z=571.14(C ₃₉ H ₂₅ NS ₂ =571.75)
2-11	m/z=695.17(C ₄₉ H ₂₉ NS ₂ =695.89)	2-12	m/z=693.16(C ₄₉ H ₂₇ NS ₂ =693.88)
2-13	m/z=622.15(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S ₂ =622.80)	2-14	m/z=672.17(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S ₂ =672.86)
2-15	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	2-16	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
2-17	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	2-18	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)
2-19	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)	2-20	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
2-21	m/z=853.23(C ₅₇ H ₃₅ N ₅ S ₂ =854.05)	2-22	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
2-23	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)	2-24	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)
2-25	m/z=850.25(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ S ₂ =851.09)	2-26	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)
2-27	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ S ₃ =881.14)	2-28	m/z=1014.31(C ₇₃ H ₄₆ N ₂ S ₂ =1015.29)
2-29	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)	2-30	m/z=776.21(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S ₂ =776.97)
2-31	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ S ₃ =881.14)	2-32	m/z=939.27(C ₆₆ H ₄₁ N ₃ S ₂ =940.18)
2-33	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)	2-34	m/z=626.21(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ O=626.70)
2-35	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	2-36	m/z=551.16(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ O ₂ =551.59)
2-37	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	2-38	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
2-39	m/z=380.03(C ₂₄ H ₁₂ O ₂ S=380.48)	2-40	m/z=364.06(C ₂₄ H ₁₂ O ₂ S=364.42)
3-1	m/z=669.20(C ₄₅ H ₂₇ N ₅ S=669.79)	3-2	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)
3-3	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)	3-4	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)
3-5	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	3-6	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)

[0275]

3-7	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	3-8	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
3-9	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	3-10	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
3-11	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	3-12	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
3-13	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	3-14	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
3-15	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	3-16	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
3-17	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	3-18	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
3-19	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	3-20	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
3-21	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)	3-22	m/z=755.24(C ₅₄ H ₃₃ N ₃ S=755.92)
3-23	m/z=591.18(C ₄₁ H ₂₅ N ₃ S=591.72)	3-24	m/z=681.22(C ₄₈ H ₃₁ N ₃ S=681.84)
4-1	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	4-2	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)
4-3	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	4-4	m/z=531.11(C ₃₆ H ₂₁ NS ₂ =531.69)
4-5	m/z=610.13(C ₃₉ H ₂₂ N ₄ S ₂ =610.75)	4-6	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)
4-7	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)	4-8	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
4-9	m/z=561.07(C ₃₆ H ₁₉ NS ₃ =561.74)	4-10	m/z=571.14(C ₃₉ H ₂₅ NS ₂ =571.75)
4-11	m/z=695.17(C ₄₉ H ₂₉ NS ₂ =695.89)	4-12	m/z=693.16(C ₄₉ H ₂₇ NS ₂ =693.88)
4-13	m/z=622.15(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S ₂ =622.80)	4-14	m/z=672.17(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S ₂ =672.86)
4-15	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	4-16	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
4-17	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	4-18	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)
4-19	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)	4-20	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
4-21	m/z=853.23(C ₅₇ H ₃₅ N ₅ S ₂ =854.05)	4-22	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
4-23	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)	4-24	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)
4-25	m/z=850.25(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ S ₂ =851.09)	4-26	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)
4-27	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ S ₃ =881.14)	4-28	m/z=1014.31(C ₇₃ H ₄₆ N ₂ S ₂ =1015.29)
4-29	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)	4-30	m/z=776.21(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S ₂ =776.97)
4-31	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ S ₃ =881.14)	4-32	m/z=939.27(C ₆₆ H ₄₁ N ₃ S ₂ =940.18)
4-33	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)	4-34	m/z=626.21(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ O=626.70)
4-35	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	4-36	m/z=551.16(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ O ₂ =551.59)
4-37	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	4-38	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
4-39	m/z=380.03(C ₂₄ H ₁₂ O ₂ S=380.48)	4-40	m/z=364.06(C ₂₄ H ₁₂ O ₂ S=364.42)
5-1	m/z=669.20(C ₄₅ H ₂₇ N ₅ S=669.79)	5-2	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)
5-3	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)	5-4	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)
5-5	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	5-6	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
5-7	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	5-8	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
5-9	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	5-10	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
5-11	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	5-12	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
5-13	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	5-14	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)

[0276]

5-15	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	5-16	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
5-17	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	5-18	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
5-19	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	5-20	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
5-21	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)	5-22	m/z=755.24(C ₅₄ H ₃₃ N ₃ S=755.92)
5-23	m/z=591.18(C ₄₁ H ₂₅ N ₃ S=591.72)	5-24	m/z=681.22(C ₄₈ H ₃₁ N ₃ S=681.84)
6-1	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	6-2	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)
6-3	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	6-4	m/z=531.11(C ₃₆ H ₂₁ NS ₂ =531.69)
6-5	m/z=610.13(C ₃₉ H ₂₂ N ₄ S ₂ =610.75)	6-6	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)
6-7	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)	6-8	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
6-9	m/z=561.07(C ₃₆ H ₁₉ NS ₃ =561.74)	6-10	m/z=571.14(C ₃₉ H ₂₅ NS ₂ =571.75)
6-11	m/z=695.17(C ₄₉ H ₂₉ NS ₂ =695.89)	6-12	m/z=693.16(C ₄₉ H ₂₇ NS ₂ =693.88)
6-13	m/z=622.15(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S ₂ =622.80)	6-14	m/z=672.17(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S ₂ =672.86)
6-15	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	6-16	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
6-17	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	6-18	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)
6-19	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)	6-20	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
6-21	m/z=853.23(C ₅₇ H ₃₅ N ₅ S ₂ =854.05)	6-22	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
6-23	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)	6-24	m/z=824.23(C ₅₈ H ₃₆ N ₂ S ₂ =825.05)
6-25	m/z=850.25(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ S ₂ =851.09)	6-26	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)
6-27	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₃ S ₃ =881.14)	6-28	m/z=1014.31(C ₇₃ H ₄₆ N ₂ S ₂ =1015.29)
6-29	m/z=890.28(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ S ₂ =891.15)	6-30	m/z=776.21(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S ₂ =776.97)
6-31	m/z=880.20(C ₆₀ H ₃₆ N ₂ S ₃ =881.14)	6-32	m/z=939.27(C ₆₆ H ₄₁ N ₃ S ₂ =940.18)
6-33	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)	6-34	m/z=626.21(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ O=626.70)
6-35	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	6-36	m/z=551.16(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ O ₂ =551.59)
6-37	m/z=567.14(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ OS=567.66)	6-38	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
6-39	m/z=380.03(C ₂₄ H ₁₂ OS ₂ =380.48)	6-40	m/z=364.06(C ₂₄ H ₁₂ O ₂ S=364.42)
7-1	m/z=669.20(C ₄₅ H ₂₇ N ₅ S=669.79)	7-2	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)
7-3	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)	7-4	m/z=642.19(C ₄₄ H ₂₆ N ₄ S=642.77)
7-5	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	7-6	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
7-7	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	7-8	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
7-9	m/z=745.23(C ₅₁ H ₃₁ N ₅ S=745.89)	7-10	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)
7-11	m/z=744.23(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ S=744.90)	7-12	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
7-13	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	7-14	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
7-15	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	7-16	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
7-17	m/z=719.21(C ₄₉ H ₂₉ N ₅ S=719.85)	7-18	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
7-19	m/z=178.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)	7-20	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)

[0277]

7-21	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)	7-22	m/z=755.24(C ₅₄ H ₃₃ N ₃ S=755.92)
7-23	m/z=591.18(C ₄₁ H ₂₅ N ₃ S=591.72)	7-24	m/z=681.22(C ₄₈ H ₃₁ N ₃ S=681.84)
8-1	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	8-2	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)
8-3	m/z=455.08(C ₃₀ H ₁₇ NS ₂ =455.59)	8-4	m/z=531.11(C ₃₆ H ₂₁ NS ₂ =531.69)
8-5	m/z=610.13(C ₃₉ H ₂₂ N ₄ S ₂ =610.75)	8-6	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)
8-7	m/z=609.13(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S ₂ =609.76)	8-8	m/z=583.12(C ₃₈ H ₂₁ N ₃ S ₂ =583.72)
8-9	m/z=561.07(C ₃₆ H ₁₉ NS ₃ =561.74)	8-10	m/z=571.14(C ₃₉ H ₂₅ NS ₂ =571.75)
8-11	m/z=695.17(C ₄₉ H ₂₉ NS ₂ =695.89)	8-12	m/z=693.16(C ₄₉ H ₂₇ NS ₂ =693.88)
8-13	m/z=622.15(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S ₂ =622.80)	8-14	m/z=672.17(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S ₂ =672.86)
8-15	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	8-16	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)
8-17	m/z=698.19(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S ₂ =698.90)	8-18	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)
8-19	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)	8-20	m/z=774.22(C ₅₄ H ₃₄ N ₂ S ₂ =774.99)

[0278]

[0279]

유기전기소자의 제조평가

[0280]

[실시예 1] 레드 유기발광소자(인광호스트)

[0281] 본 발명의 화합물을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 N^1 -(naphthalen-2-yl)- N^4, N^4 -bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)- N^1 -phenylbenzene-1,4-diamine (이하, 2-TNATA로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 NPD로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 1-4를 호스트 물질로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하, (piq)₂Ir(acac)로 약기함)를 도판트 물질로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 BA1q로 약기함)을 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 Alq₃로 약기함)을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

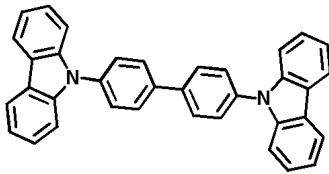
[0282] [실시예 2] 내지 [실시예 36] 레드 유기발광소자(인광호스트)

[0283] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물 1-8, 1-12, 1-16, 1-20, 2-8, 2-33-2-38, 3-4, 3-8, 3-12, 3-16, 3-20, 4-8, 4-33-4-38, 5-4, 5-8, 5-12, 5-16, 5-20, 6-8, 6-33-6-38 을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0284] [비교예 1]

[0285] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 A를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

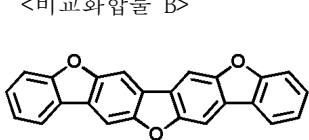
[0286] <비교화합물 A>



[0287] [비교예 2]

[0288] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

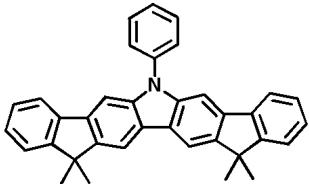
[0289] <비교화합물 B>



[0290] [비교예 3]

[0291] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

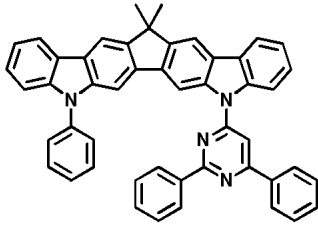
[0292] <비교화합물 C>



[0293] [비교예 4]

[0297] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0298] <비교화합물 D>

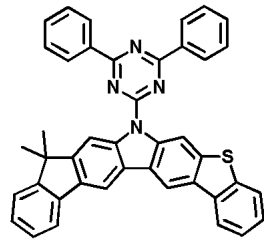


[0299]

[0300] [비교예 5]

[0301] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0302] <비교화합물 E>

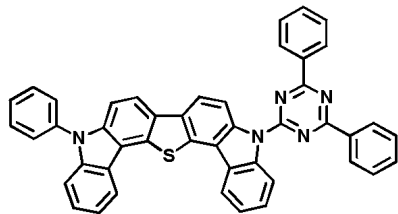


[0303]

[0304] [비교예 6]

[0305] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-4 대신 하기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0306] <비교화합물 F>



[0307]

[0308] 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 36, 비교예 1 내지 비교예 6에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 4와 같다.

[0309] [표 4]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교화합물 A	6.8	34.2	2500.0	7.3	51.6	(0.66, 0.32)
비교예(2)	비교화합물 B	6.9	31.3	2500.0	8.0	76.6	(0.67, 0.32)
비교예(3)	비교화합물 C	6.7	30.1	2500.0	8.3	74.3	(0.66, 0.32)
비교예(4)	비교화합물 D	6.5	28.7	2500.0	8.7	71.3	(0.66, 0.33)
비교예(5)	비교화합물 E	6.3	26.9	2500.0	9.3	72.5	(0.65, 0.32)
비교예(6)	비교화합물 F	6.1	25.6	2500.0	9.8	85.8	(0.66, 0.32)
실시예(1)	화합물(1-4)	5.8	23.3	2500.0	10.7	117.7	(0.66, 0.33)
실시예(2)	화합물(1-8)	5.6	16.9	2500.0	14.8	103.6	(0.66, 0.32)
실시예(3)	화합물(1-12)	5.3	20.0	2500.0	12.5	95.6	(0.65, 0.32)
실시예(4)	화합물(1-16)	5.7	16.7	2500.0	15.0	128.2	(0.66, 0.32)
실시예(5)	화합물(1-20)	5.4	23.5	2500.0	10.6	105.9	(0.66, 0.32)
실시예(6)	화합물(2-8)	5.3	21.7	2500.0	11.5	109.8	(0.67, 0.32)
실시예(7)	화합물(2-33)	5.5	18.3	2500.0	13.7	99.9	(0.66, 0.32)
실시예(8)	화합물(2-34)	5.6	18.4	2500.0	13.6	98.0	(0.66, 0.32)
실시예(9)	화합물(2-35)	5.4	19.4	2500.0	12.9	98.6	(0.66, 0.33)
실시예(10)	화합물(2-36)	5.4	19.5	2500.0	12.8	129.7	(0.66, 0.32)
실시예(11)	화합물(2-37)	5.3	17.3	2500.0	14.5	136.3	(0.65, 0.32)
실시예(12)	화합물(2-38)	5.6	19.9	2500.0	12.5	123.3	(0.66, 0.32)
실시예(13)	화합물(3-4)	5.8	23.6	2500.0	10.6	90.7	(0.66, 0.32)
실시예(14)	화합물(3-8)	5.3	18.0	2500.0	13.9	126.9	(0.67, 0.32)
실시예(15)	화합물(3-12)	5.6	22.7	2500.0	11.0	137.8	(0.66, 0.32)
실시예(16)	화합물(3-16)	5.6	24.6	2500.0	10.2	126.8	(0.67, 0.32)
실시예(17)	화합물(3-20)	5.8	22.2	2500.0	11.2	145.7	(0.66, 0.32)
실시예(18)	화합물(4-8)	5.7	18.9	2500.0	13.2	108.5	(0.66, 0.32)
실시예(19)	화합물(4-33)	5.7	18.2	2500.0	13.8	97.7	(0.66, 0.33)
실시예(20)	화합물(4-34)	5.7	19.6	2500.0	12.8	118.5	(0.66, 0.32)
실시예(21)	화합물(4-35)	5.5	23.7	2500.0	10.5	132.4	(0.65, 0.32)
실시예(22)	화합물(4-36)	5.7	17.4	2500.0	14.3	114.4	(0.66, 0.32)
실시예(23)	화합물(4-37)	5.5	18.9	2500.0	13.2	131.1	(0.66, 0.32)
실시예(24)	화합물(4-38)	5.4	20.6	2500.0	12.2	118.8	(0.67, 0.32)
실시예(25)	화합물(5-4)	5.7	19.1	2500.0	13.1	96.2	(0.66, 0.32)
실시예(26)	화합물(5-8)	5.6	21.6	2500.0	11.6	138.3	(0.67, 0.32)
실시예(27)	화합물(5-12)	5.7	20.5	2500.0	12.2	141.1	(0.66, 0.32)
실시예(28)	화합물(5-16)	5.6	19.5	2500.0	12.8	119.0	(0.66, 0.32)

[0310]

실시예(29)	화합물(5-20)	5.5	17.3	2500.0	14.5	145.5	(0.66, 0.33)
실시예(30)	화합물(6-8)	5.7	21.2	2500.0	11.8	105.1	(0.66, 0.32)
실시예(31)	화합물(6-33)	5.5	20.8	2500.0	12.0	145.9	(0.65, 0.32)
실시예(32)	화합물(6-34)	5.6	20.1	2500.0	12.5	133.8	(0.66, 0.32)
실시예(33)	화합물(6-35)	5.4	24.3	2500.0	10.3	99.0	(0.66, 0.32)
실시예(34)	화합물(6-36)	5.6	17.0	2500.0	14.7	105.7	(0.67, 0.32)
실시예(35)	화합물(6-37)	5.4	17.0	2500.0	14.7	145.8	(0.66, 0.32)
실시예(36)	화합물(6-38)	5.4	19.9	2500.0	12.5	105.8	(0.67, 0.32)

[0311]

[0312] [실시예 37] 그린 유기발광소자(인광호스트)

[0313] 본 발명의 화합물을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 1-1을 호스트 물질로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하, Ir(ppy)₃로 약기함)를 도판트 물질로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BA1q를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃를 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0314] **[실시예 38] 내지 [실시예 192] 그린 유기발광소자(인광호스트)**

[0315] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물 1-2~1-3, 1-5~1-7, 1-9~1-11, 1-13~1-15, 1-17~1-19, 1-21~1-24, 2-1~2-7, 2-9~4-32, 2-39~2-40, 3-1~3-3, 3-5~3-7, 3-9~3-11, 3-13~3-15, 3-17~3-19, 3-21~3-24, 4-1~4-7, 4-9~4-32, 4-39~4-40, 5-1~5-3, 5-5~5-7, 5-9~5-11, 5-13~5-15, 5-17~5-19, 5-21~5-24, 6-1~6-7, 6-9~6-32, 6-39~6-40을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0316] **[비교예 7]**

[0317] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 A를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0318] **[비교예 8]**

[0319] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0320] **[비교예 9]**

[0321] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0322] **[비교예 10]**

[0323] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0324] **[비교예 11]**

[0325] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0326] **[비교예 6]**

[0327] 발광 호스트 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 상기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 37과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0328] 본 발명의 실시예 37 내지 실시예 192, 비교예 7 내지 비교예 12에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 5와 같다.

[0329]

[표 5]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(7)	비교화합물 A	6.5	20.0	5000.0	25.0	73.8	(0.31, 0.60)
비교예(8)	비교화합물 B	6.5	15.1	5000.0	33.1	63.8	(0.31, 0.61)
비교예(9)	비교화합물 C	6.4	14.2	5000.0	35.3	75.7	(0.31, 0.60)
비교예(10)	비교화합물 D	6.3	13.6	5000.0	36.8	73.1	(0.33, 0.61)
비교예(11)	비교화합물 E	6.2	12.9	5000.0	38.7	59.1	(0.30, 0.60)
비교예(12)	비교화합물 F	6.0	12.5	5000.0	40.1	74.7	(0.31, 0.61)
실시예(37)	화합물(1-1)	5.4	9.5	5000.0	52.5	140.7	(0.31, 0.60)
실시예(38)	화합물(1-2)	5.3	10.0	5000.0	50.2	118.1	(0.33, 0.61)
실시예(39)	화합물(1-3)	5.2	9.4	5000.0	53.0	141.8	(0.32, 0.61)
실시예(40)	화합물(1-5)	5.4	10.4	5000.0	48.0	144.6	(0.33, 0.60)
실시예(41)	화합물(1-6)	5.4	11.1	5000.0	44.9	123.6	(0.32, 0.61)
실시예(42)	화합물(1-7)	5.1	10.8	5000.0	46.4	127.5	(0.31, 0.60)
실시예(43)	화합물(1-9)	5.2	11.3	5000.0	44.4	139.7	(0.31, 0.61)
실시예(44)	화합물(1-10)	5.3	10.4	5000.0	47.9	127.4	(0.31, 0.60)
실시예(45)	화합물(1-11)	5.3	9.3	5000.0	53.6	149.6	(0.33, 0.61)
실시예(46)	화합물(1-13)	5.0	11.2	5000.0	44.6	122.9	(0.30, 0.60)
실시예(47)	화합물(1-14)	5.1	9.5	5000.0	52.5	148.1	(0.31, 0.61)
실시예(48)	화합물(1-15)	5.2	9.5	5000.0	52.5	123.8	(0.31, 0.60)
실시예(49)	화합물(1-17)	5.0	10.1	5000.0	49.7	129.0	(0.33, 0.61)
실시예(50)	화합물(1-18)	5.0	10.1	5000.0	49.4	110.1	(0.32, 0.61)
실시예(51)	화합물(1-19)	5.2	11.6	5000.0	43.0	140.4	(0.33, 0.60)
실시예(52)	화합물(1-21)	5.2	11.4	5000.0	44.0	105.5	(0.32, 0.61)
실시예(53)	화합물(1-22)	5.1	10.3	5000.0	48.6	123.5	(0.31, 0.60)
실시예(54)	화합물(1-23)	5.1	9.9	5000.0	50.5	112.3	(0.31, 0.61)
실시예(55)	화합물(1-24)	5.2	11.3	5000.0	44.1	115.3	(0.31, 0.60)
실시예(56)	화합물(2-1)	5.4	11.4	5000.0	44.0	126.4	(0.33, 0.61)
실시예(57)	화합물(2-2)	5.2	10.0	5000.0	50.2	118.1	(0.30, 0.60)
실시예(58)	화합물(2-3)	5.0	9.6	5000.0	52.1	91.9	(0.31, 0.61)
실시예(59)	화합물(2-4)	5.4	9.3	5000.0	54.0	102.9	(0.31, 0.60)
실시예(60)	화합물(2-5)	5.5	10.9	5000.0	45.9	137.6	(0.33, 0.61)
실시예(61)	화합물(2-6)	5.0	9.9	5000.0	50.4	138.3	(0.32, 0.61)
실시예(62)	화합물(2-7)	5.4	10.7	5000.0	46.8	112.7	(0.33, 0.60)
실시예(63)	화합물(2-9)	5.2	10.8	5000.0	46.3	123.6	(0.31, 0.60)
실시예(64)	화합물(2-10)	5.1	10.2	5000.0	49.1	148.0	(0.31, 0.61)

[0330]

실시예(65)	화합물(2-11)	5.3	9.1	5000.0	54.7	96.8	(0.31, 0.60)
실시예(66)	화합물(2-12)	5.3	9.3	5000.0	53.5	100.6	(0.33, 0.61)
실시예(67)	화합물(2-13)	5.2	9.3	5000.0	53.7	106.0	(0.30, 0.60)
실시예(68)	화합물(2-14)	5.2	9.9	5000.0	50.7	102.6	(0.31, 0.61)
실시예(69)	화합물(2-15)	5.0	9.5	5000.0	52.6	108.5	(0.31, 0.60)
실시예(70)	화합물(2-16)	5.2	9.7	5000.0	51.7	103.5	(0.33, 0.61)
실시예(71)	화합물(2-17)	5.3	10.8	5000.0	46.4	127.3	(0.32, 0.61)
실시예(72)	화합물(2-18)	5.2	9.3	5000.0	53.9	134.2	(0.33, 0.60)
실시예(73)	화합물(2-19)	5.4	11.2	5000.0	44.5	147.8	(0.32, 0.61)
실시예(74)	화합물(2-20)	5.2	9.6	5000.0	52.1	134.4	(0.31, 0.60)
실시예(75)	화합물(2-21)	5.3	11.6	5000.0	43.1	133.7	(0.31, 0.61)
실시예(76)	화합물(2-22)	5.0	9.3	5000.0	53.6	146.7	(0.31, 0.60)
실시예(77)	화합물(2-23)	5.2	11.4	5000.0	43.9	130.3	(0.33, 0.61)
실시예(78)	화합물(2-24)	5.1	11.2	5000.0	44.7	90.1	(0.30, 0.60)
실시예(79)	화합물(2-25)	5.2	10.3	5000.0	48.6	96.7	(0.31, 0.61)
실시예(80)	화합물(2-26)	5.3	9.6	5000.0	52.2	138.0	(0.31, 0.60)
실시예(81)	화합물(2-27)	5.0	11.3	5000.0	44.3	136.1	(0.33, 0.61)
실시예(82)	화합물(2-28)	5.0	11.4	5000.0	44.0	125.1	(0.32, 0.61)
실시예(83)	화합물(2-29)	5.4	9.7	5000.0	51.8	115.9	(0.33, 0.60)
실시예(84)	화합물(2-30)	5.2	9.6	5000.0	51.9	114.2	(0.32, 0.61)
실시예(85)	화합물(2-31)	5.2	10.5	5000.0	47.7	95.5	(0.31, 0.60)
실시예(86)	화합물(2-32)	5.3	9.6	5000.0	52.1	146.9	(0.31, 0.61)
실시예(87)	화합물(2-39)	5.0	11.0	5000.0	45.5	145.9	(0.31, 0.60)
실시예(88)	화합물(2-40)	5.3	11.1	5000.0	45.0	143.1	(0.33, 0.61)
실시예(89)	화합물(3-1)	5.1	10.7	5000.0	46.8	144.0	(0.31, 0.60)
실시예(90)	화합물(3-2)	5.4	10.1	5000.0	49.5	134.0	(0.33, 0.61)
실시예(91)	화합물(3-3)	5.4	10.0	5000.0	50.1	123.6	(0.32, 0.61)
실시예(92)	화합물(3-5)	5.3	10.3	5000.0	48.6	135.1	(0.33, 0.60)
실시예(93)	화합물(3-6)	5.4	10.9	5000.0	46.0	115.5	(0.32, 0.61)
실시예(94)	화합물(3-7)	5.1	10.6	5000.0	47.1	124.5	(0.31, 0.60)
실시예(95)	화합물(3-9)	5.1	11.0	5000.0	45.4	120.1	(0.31, 0.61)
실시예(96)	화합물(3-10)	5.4	10.0	5000.0	50.2	97.9	(0.31, 0.60)
실시예(97)	화합물(3-11)	5.2	9.6	5000.0	52.2	97.0	(0.33, 0.61)
실시예(98)	화합물(3-13)	5.3	9.5	5000.0	52.6	99.0	(0.30, 0.60)
실시예(99)	화합물(3-14)	5.4	11.5	5000.0	43.6	114.9	(0.31, 0.61)
실시예(100)	화합물(3-15)	5.3	11.0	5000.0	45.4	142.6	(0.31, 0.60)

[0331]

실시예(101)	화합물(3-17)	5.2	10.2	5000.0	48.9	104.4	(0.33, 0.61)
실시예(102)	화합물(3-18)	5.1	9.9	5000.0	50.7	120.4	(0.32, 0.61)
실시예(103)	화합물(3-19)	5.4	10.1	5000.0	49.5	111.6	(0.33, 0.60)
실시예(104)	화합물(3-21)	5.1	9.9	5000.0	50.6	121.6	(0.32, 0.61)
실시예(105)	화합물(3-22)	5.4	9.2	5000.0	54.3	90.4	(0.31, 0.60)
실시예(106)	화합물(3-23)	5.0	9.2	5000.0	54.4	121.2	(0.31, 0.61)
실시예(107)	화합물(3-24)	5.4	10.8	5000.0	46.2	129.9	(0.31, 0.60)
실시예(108)	화합물(4-1)	5.0	11.5	5000.0	43.5	123.2	(0.33, 0.61)
실시예(109)	화합물(4-2)	5.3	11.1	5000.0	44.9	134.4	(0.30, 0.60)
실시예(110)	화합물(4-3)	5.2	11.1	5000.0	45.2	94.7	(0.31, 0.61)
실시예(111)	화합물(4-4)	5.4	11.2	5000.0	44.5	144.2	(0.31, 0.60)
실시예(112)	화합물(4-5)	5.3	9.9	5000.0	50.8	115.9	(0.33, 0.61)
실시예(113)	화합물(4-6)	5.2	11.5	5000.0	43.7	108.0	(0.32, 0.61)
실시예(114)	화합물(4-7)	5.3	10.0	5000.0	50.1	119.9	(0.33, 0.60)
실시예(115)	화합물(4-9)	5.2	10.1	5000.0	49.7	126.1	(0.31, 0.60)
실시예(116)	화합물(4-10)	5.1	10.8	5000.0	46.3	109.9	(0.31, 0.61)
실시예(117)	화합물(4-11)	5.3	9.2	5000.0	54.2	146.3	(0.31, 0.60)
실시예(118)	화합물(4-12)	5.2	10.7	5000.0	46.8	133.4	(0.33, 0.61)
실시예(119)	화합물(4-13)	5.2	11.3	5000.0	44.1	112.3	(0.30, 0.60)
실시예(120)	화합물(4-14)	5.4	10.9	5000.0	45.9	92.2	(0.31, 0.61)
실시예(121)	화합물(4-15)	5.2	10.6	5000.0	47.3	132.5	(0.31, 0.60)
실시예(122)	화합물(4-16)	5.2	10.5	5000.0	47.5	108.4	(0.33, 0.61)
실시예(123)	화합물(4-17)	5.0	9.7	5000.0	51.6	95.8	(0.32, 0.61)
실시예(124)	화합물(4-18)	5.5	10.6	5000.0	47.1	142.4	(0.33, 0.60)
실시예(125)	화합물(4-19)	5.0	10.8	5000.0	46.5	128.3	(0.32, 0.61)
실시예(126)	화합물(4-20)	5.3	11.3	5000.0	44.1	132.5	(0.31, 0.60)
실시예(127)	화합물(4-21)	5.0	10.3	5000.0	48.7	106.4	(0.31, 0.61)
실시예(128)	화합물(4-22)	5.1	9.3	5000.0	54.0	95.5	(0.31, 0.60)
실시예(129)	화합물(4-23)	5.1	9.1	5000.0	54.8	114.4	(0.33, 0.61)
실시예(130)	화합물(4-24)	5.1	9.5	5000.0	52.4	101.6	(0.30, 0.60)
실시예(131)	화합물(4-25)	5.4	10.5	5000.0	47.7	99.2	(0.31, 0.61)
실시예(132)	화합물(4-26)	5.0	9.4	5000.0	53.4	118.4	(0.31, 0.60)
실시예(133)	화합물(4-27)	5.4	9.4	5000.0	53.1	136.7	(0.33, 0.61)
실시예(134)	화합물(4-28)	5.4	9.4	5000.0	53.1	126.4	(0.32, 0.61)
실시예(135)	화합물(4-29)	5.2	9.2	5000.0	54.1	106.6	(0.33, 0.60)
실시예(136)	화합물(4-30)	5.0	10.1	5000.0	49.4	112.6	(0.32, 0.61)

[0332]

실시예(137)	화합물(4-31)	5.4	10.2	5000.0	48.9	140.3	(0.31, 0.60)
실시예(138)	화합물(4-32)	5.1	10.9	5000.0	45.8	92.3	(0.31, 0.61)
실시예(139)	화합물(4-39)	5.3	10.9	5000.0	45.9	91.8	(0.31, 0.60)
실시예(140)	화합물(4-40)	5.1	9.7	5000.0	51.7	112.5	(0.33, 0.61)
실시예(141)	화합물(5-1)	5.2	9.8	5000.0	50.8	136.7	(0.31, 0.60)
실시예(142)	화합물(5-2)	5.2	10.9	5000.0	46.0	115.6	(0.33, 0.61)
실시예(143)	화합물(5-3)	5.1	9.3	5000.0	53.6	110.2	(0.32, 0.61)
실시예(144)	화합물(5-5)	5.0	10.1	5000.0	49.6	99.5	(0.33, 0.60)
실시예(145)	화합물(5-6)	5.2	9.6	5000.0	51.9	100.4	(0.32, 0.61)
실시예(146)	화합물(5-7)	5.4	9.7	5000.0	51.6	106.8	(0.31, 0.60)
실시예(147)	화합물(5-9)	5.5	9.1	5000.0	54.9	128.6	(0.31, 0.61)
실시예(148)	화합물(5-10)	5.4	9.9	5000.0	50.6	136.1	(0.31, 0.60)
실시예(149)	화합물(5-11)	5.3	9.7	5000.0	51.4	149.2	(0.33, 0.61)
실시예(150)	화합물(5-13)	5.3	11.6	5000.0	43.1	111.0	(0.30, 0.60)
실시예(151)	화합물(5-14)	5.5	10.4	5000.0	48.1	136.1	(0.31, 0.61)
실시예(152)	화합물(5-15)	5.4	10.6	5000.0	47.0	134.0	(0.31, 0.60)
실시예(153)	화합물(5-17)	5.3	9.7	5000.0	51.7	125.5	(0.33, 0.61)
실시예(154)	화합물(5-18)	5.3	10.1	5000.0	49.3	112.2	(0.32, 0.61)
실시예(155)	화합물(5-19)	5.1	10.5	5000.0	47.6	91.0	(0.33, 0.60)
실시예(156)	화합물(5-21)	5.1	10.3	5000.0	48.4	94.0	(0.32, 0.61)
실시예(157)	화합물(5-22)	5.0	9.4	5000.0	53.4	119.4	(0.31, 0.60)
실시예(158)	화합물(5-23)	5.5	11.0	5000.0	45.6	104.0	(0.31, 0.61)
실시예(159)	화합물(5-24)	5.3	9.6	5000.0	52.0	135.5	(0.31, 0.60)
실시예(160)	화합물(6-1)	5.0	10.2	5000.0	49.0	142.0	(0.33, 0.61)
실시예(161)	화합물(6-2)	5.1	9.9	5000.0	50.5	123.9	(0.30, 0.60)
실시예(162)	화합물(6-3)	5.4	10.8	5000.0	46.4	116.5	(0.31, 0.61)
실시예(163)	화합물(6-4)	5.3	10.8	5000.0	46.2	92.2	(0.31, 0.60)
실시예(164)	화합물(6-5)	5.3	11.3	5000.0	44.3	138.4	(0.33, 0.61)
실시예(165)	화합물(6-6)	5.0	9.8	5000.0	51.2	128.9	(0.32, 0.61)
실시예(166)	화합물(6-7)	5.4	10.8	5000.0	46.3	100.2	(0.33, 0.60)
실시예(167)	화합물(6-9)	5.2	9.9	5000.0	50.7	134.9	(0.31, 0.60)
실시예(168)	화합물(6-10)	5.1	9.4	5000.0	53.0	148.8	(0.31, 0.61)
실시예(169)	화합물(6-11)	5.4	9.3	5000.0	53.8	106.7	(0.31, 0.60)
실시예(170)	화합물(6-12)	5.1	10.1	5000.0	49.4	149.0	(0.33, 0.61)
실시예(171)	화합물(6-13)	5.4	10.1	5000.0	49.5	133.3	(0.30, 0.60)
실시예(172)	화합물(6-14)	5.0	11.0	5000.0	45.5	147.1	(0.31, 0.61)

[0333]

실시예(173)	화합물(6-15)	5.0	10.7	5000.0	46.6	93.4	(0.31, 0.60)
실시예(174)	화합물(6-16)	5.2	10.7	5000.0	46.9	94.8	(0.33, 0.61)
실시예(175)	화합물(6-17)	5.5	10.1	5000.0	49.6	130.7	(0.32, 0.61)
실시예(176)	화합물(6-18)	5.1	9.5	5000.0	52.7	145.0	(0.33, 0.60)
실시예(177)	화합물(6-19)	5.2	9.2	5000.0	54.6	127.1	(0.32, 0.61)
실시예(178)	화합물(6-20)	5.4	11.6	5000.0	43.2	137.9	(0.31, 0.60)
실시예(179)	화합물(6-21)	5.4	9.1	5000.0	54.8	142.9	(0.31, 0.61)
실시예(180)	화합물(6-22)	5.4	10.5	5000.0	47.8	116.6	(0.31, 0.60)
실시예(181)	화합물(6-23)	5.1	11.1	5000.0	45.0	125.9	(0.33, 0.61)
실시예(182)	화합물(6-24)	5.4	11.2	5000.0	44.6	107.2	(0.30, 0.60)
실시예(183)	화합물(6-25)	5.2	10.9	5000.0	46.0	104.6	(0.31, 0.61)
실시예(184)	화합물(6-26)	5.1	9.6	5000.0	52.1	133.2	(0.31, 0.60)
실시예(185)	화합물(6-27)	5.0	10.4	5000.0	48.0	112.5	(0.33, 0.61)
실시예(186)	화합물(6-28)	5.2	11.4	5000.0	43.8	130.6	(0.32, 0.61)
실시예(187)	화합물(6-29)	5.5	10.8	5000.0	46.3	101.5	(0.33, 0.60)
실시예(188)	화합물(6-30)	5.0	10.6	5000.0	47.0	115.1	(0.32, 0.61)
실시예(189)	화합물(6-31)	5.4	11.6	5000.0	43.2	109.1	(0.31, 0.60)
실시예(190)	화합물(6-32)	5.0	11.5	5000.0	43.6	125.1	(0.31, 0.61)
실시예(191)	화합물(6-39)	5.1	11.1	5000.0	44.9	94.6	(0.31, 0.60)
실시예(192)	화합물(6-40)	5.5	11.3	5000.0	44.1	117.5	(0.33, 0.61)

[0334]

[0335]

상기 표 4와 표 5의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광 호스트(인광호스트)의 재료로 사용한 유기전기발광소자는 비교화합물 A 내지 F를 발광 호스트(인광호스트)의 재료로 사용한 유기전기발광소자에 비해 발광효율, 구동전압 및 수명이 현저히 개선되었다.

[0336]

NPB인 비교화합물 A 및 유사한 7원 고리화합물인 비교화합물 B 내지 F를 발광 호스트의 재료로 사용한 소자보다 본 발명의 화합물을 발광 호스트의 재료로 사용한 소자가 우수한 결과를 보여주고 있으며, 헤테로 원자의 종류 및 융합된(fused) 위치에 따라 특성이 다른 것을 확인할 수 있다. 비교 화합물 중에서는 N과 S를 포함하는 7원 헤테로고리 화합물인 비교화합물 F의 소자 결과가 우수하였으며, N과 S를 포함하지만 융합된(fused) 위치가 상이한 본 발명의 화합물이 비교화합물 F보다 더 우수한 소자 결과를 나타내었다. 이는 헤테로고리의 원소의 종류 그리고 융합된(fused) 위치에 따라 화합물의 특성이 현저히 달라질 수 있음을 시사하고 있다.

[0337]

[실시예 193] 레드 유기발광소자(발광보조층)

[0338]

본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 1-24를 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하 CBP로 약기함)를 호스트 물질로, (piq)₂Ir(acac)를 도판트 물질로 하여 95:5 중량 비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BA1q를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0339]

[실시예 194] 내지 [실시예 255] 레드 유기발광소자(발광보조층)

[0340]

발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 2-13-2-32, 3-24, 4-13-4-32, 5-24, 6-13-6-32를 사용한 점을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0341]

[비교예 13]

[0342]

발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였

다.

[0343] **[비교예 14]**

[0344] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0345] **[비교예 15]**

[0346] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0347] **[비교예 16]**

[0348] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0349] **[비교예 17]**

[0350] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0351] **[비교예 18]**

[0352] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 실시예 193과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0353] 본 발명의 실시예 193 내지 실시예 255, 비교예 13 내지 비교예 18에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 6과 같다.

[0354] [표 6]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/㎠)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(13)	-	6.8	34.2	2500.0	7.3	51.6	(0.66, 0.32)
비교예(14)	비교화합물 B	6.8	27.6	2500.0	9.1	65.4	(0.67, 0.32)
비교예(15)	비교화합물 C	6.8	25.9	2500.0	9.6	53.9	(0.66, 0.32)
비교예(16)	비교화합물 D	6.9	26.8	2500.0	9.3	69.5	(0.66, 0.33)
비교예(17)	비교화합물 E	6.9	26.3	2500.0	9.5	71.0	(0.65, 0.32)
비교예(18)	비교화합물 F	7.0	25.1	2500.0	10.0	89.0	(0.66, 0.32)
실시예(193)	화합물(1-24)	6.8	13.2	2500.0	19.0	143.9	(0.67, 0.32)
실시예(194)	화합물(2-13)	6.8	16.4	2500.0	15.2	149.3	(0.66, 0.32)
실시예(195)	화합물(2-14)	6.8	12.6	2500.0	19.8	91.0	(0.66, 0.32)
실시예(196)	화합물(2-15)	6.9	13.4	2500.0	18.7	131.2	(0.66, 0.33)
실시예(197)	화합물(2-16)	6.9	14.9	2500.0	16.7	111.6	(0.66, 0.32)
실시예(198)	화합물(2-17)	7.0	13.2	2500.0	18.9	92.1	(0.65, 0.32)
실시예(199)	화합물(2-18)	6.9	13.0	2500.0	19.2	103.6	(0.66, 0.32)
실시예(200)	화합물(2-19)	7.0	12.8	2500.0	19.5	103.6	(0.66, 0.32)
실시예(201)	화합물(2-20)	6.9	13.1	2500.0	19.0	91.8	(0.67, 0.32)
실시예(202)	화합물(2-21)	6.8	16.2	2500.0	15.5	111.4	(0.66, 0.32)
실시예(203)	화합물(2-22)	6.9	15.2	2500.0	16.5	115.7	(0.67, 0.32)
실시예(204)	화합물(2-23)	6.8	14.7	2500.0	17.0	142.0	(0.66, 0.32)
실시예(205)	화합물(2-24)	6.9	12.6	2500.0	19.9	135.0	(0.66, 0.32)
실시예(206)	화합물(2-25)	6.9	15.8	2500.0	15.8	94.6	(0.66, 0.33)
실시예(207)	화합물(2-26)	6.9	15.2	2500.0	16.5	98.8	(0.66, 0.32)
실시예(208)	화합물(2-27)	7.0	12.8	2500.0	19.5	131.6	(0.65, 0.32)
실시예(209)	화합물(2-28)	6.9	13.7	2500.0	18.2	141.9	(0.66, 0.32)
실시예(210)	화합물(2-29)	6.9	12.9	2500.0	19.4	97.5	(0.66, 0.32)
실시예(211)	화합물(2-30)	6.9	15.7	2500.0	16.0	124.4	(0.67, 0.32)
실시예(212)	화합물(2-31)	6.8	14.4	2500.0	17.4	97.8	(0.66, 0.32)

[0355]

실시예(213)	화합물(2-32)	6.9	14.0	2500.0	17.9	137.0	(0.67, 0.32)
실시예(214)	화합물(3-24)	6.9	15.3	2500.0	16.3	98.2	(0.66, 0.32)
실시예(215)	화합물(4-13)	6.9	14.3	2500.0	17.4	103.3	(0.66, 0.32)
실시예(216)	화합물(4-14)	6.9	14.0	2500.0	17.8	116.5	(0.66, 0.33)
실시예(217)	화합물(4-15)	6.9	13.7	2500.0	18.3	92.8	(0.66, 0.32)
실시예(218)	화합물(4-16)	6.9	12.7	2500.0	19.7	142.7	(0.65, 0.32)
실시예(219)	화합물(4-17)	6.8	16.5	2500.0	15.1	147.2	(0.66, 0.32)
실시예(220)	화합물(4-18)	6.9	16.2	2500.0	15.4	141.6	(0.66, 0.32)
실시예(221)	화합물(4-19)	6.9	16.0	2500.0	15.6	126.5	(0.67, 0.32)
실시예(222)	화합물(4-20)	6.9	13.4	2500.0	18.7	145.7	(0.66, 0.32)
실시예(223)	화합물(4-21)	6.9	16.3	2500.0	15.4	134.4	(0.67, 0.32)
실시예(224)	화합물(4-22)	6.9	14.7	2500.0	17.0	142.4	(0.66, 0.32)
실시예(225)	화합물(4-23)	7.0	13.6	2500.0	18.3	117.3	(0.67, 0.32)
실시예(226)	화합물(4-24)	6.9	14.7	2500.0	17.0	92.2	(0.66, 0.32)
실시예(227)	화합물(4-25)	6.9	16.0	2500.0	15.6	98.5	(0.66, 0.33)
실시예(228)	화합물(4-26)	7.0	14.8	2500.0	16.9	136.4	(0.65, 0.32)
실시예(229)	화합물(4-27)	6.8	15.8	2500.0	15.8	135.9	(0.66, 0.32)
실시예(230)	화합물(4-28)	6.9	13.2	2500.0	18.9	99.2	(0.67, 0.32)
실시예(231)	화합물(4-29)	6.9	16.5	2500.0	15.1	121.3	(0.66, 0.32)
실시예(232)	화합물(4-30)	6.8	15.0	2500.0	16.7	132.9	(0.66, 0.32)
실시예(233)	화합물(4-31)	6.9	13.1	2500.0	19.0	91.5	(0.66, 0.33)
실시예(234)	화합물(4-32)	6.9	14.6	2500.0	17.2	108.5	(0.66, 0.32)
실시예(235)	화합물(5-24)	6.9	12.5	2500.0	20.0	135.0	(0.65, 0.32)
실시예(236)	화합물(6-13)	6.9	16.4	2500.0	15.2	133.6	(0.66, 0.32)
실시예(237)	화합물(6-14)	6.9	13.9	2500.0	18.0	135.7	(0.66, 0.32)
실시예(238)	화합물(6-15)	7.0	13.4	2500.0	18.7	101.7	(0.67, 0.32)
실시예(239)	화합물(6-16)	6.8	13.6	2500.0	18.3	91.5	(0.66, 0.32)
실시예(240)	화합물(6-17)	6.9	14.1	2500.0	17.7	92.0	(0.67, 0.32)
실시예(241)	화합물(6-18)	6.9	12.9	2500.0	19.4	98.4	(0.66, 0.32)
실시예(242)	화합물(6-19)	7.0	13.4	2500.0	18.6	113.3	(0.66, 0.32)
실시예(243)	화합물(6-20)	6.9	13.1	2500.0	19.1	93.0	(0.66, 0.33)
실시예(244)	화합물(6-21)	7.0	13.2	2500.0	18.9	109.9	(0.66, 0.32)
실시예(245)	화합물(6-22)	6.8	15.4	2500.0	16.2	100.8	(0.65, 0.32)
실시예(246)	화합물(6-23)	6.8	15.4	2500.0	16.2	112.3	(0.66, 0.32)
실시예(247)	화합물(6-24)	6.9	13.3	2500.0	18.7	96.1	(0.66, 0.32)
실시예(248)	화합물(6-25)	7.0	13.3	2500.0	18.8	112.5	(0.67, 0.32)

[0356]

실시예(249)	화합물(6-26)	7.0	13.6	2500.0	18.4	123.4	(0.66, 0.32)
실시예(250)	화합물(6-27)	6.9	14.6	2500.0	17.2	121.0	(0.67, 0.32)
실시예(251)	화합물(6-28)	6.9	16.4	2500.0	15.3	97.2	(0.66, 0.32)
실시예(252)	화합물(6-29)	7.0	13.8	2500.0	18.1	121.6	(0.66, 0.32)
실시예(253)	화합물(6-30)	7.0	16.5	2500.0	15.1	109.5	(0.66, 0.33)
실시예(254)	화합물(6-31)	6.9	16.1	2500.0	15.6	132.7	(0.66, 0.32)
실시예(255)	화합물(6-32)	6.9	14.9	2500.0	16.8	113.1	(0.65, 0.32)

[0357]

[0358]

[실시예 256] 그린 유기발광소자(발광보조층)

[0359]

본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명

의 화합물 1-24를 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃를 도판트 물질로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0360] [실시에 257] 내지 [실시에 318] 그린 유기발광소자(발광보조층)

[0361] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의 화합물 2-13-2-32, 3-24, 4-13-4-32, 5-24, 6-13-6-32를 사용한 점을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0362] [비교예 19]

[0363] 발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0364] [비교예 20]

[0365] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0366] [비교예 21]

[0367] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0368] [비교예 22]

[0369] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0370] [비교예 23]

[0371] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0372] [비교예 24]

[0373] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 1-24 대신 상기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 실시예 256과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0374] 본 발명의 실시예 256 내지 실시예 318, 비교예 19 내지 비교예 24에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 7과 같다.

[0375] [표 7]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(19)	-	6.5	20.0	5000.0	25.0	73.8	(0.31, 0.60)
비교예(20)	비교화합물 B	6.8	13.0	5000.0	38.4	80.4	(0.31, 0.61)
비교예(21)	비교화합물 C	7.0	13.9	5000.0	36.0	85.3	(0.31, 0.60)
비교예(22)	비교화합물 D	6.7	13.6	5000.0	36.9	85.5	(0.33, 0.61)
비교예(23)	비교화합물 E	7.0	13.0	5000.0	38.5	84.3	(0.30, 0.60)
비교예(24)	비교화합물 F	6.6	13.4	5000.0	37.3	83.6	(0.31, 0.61)
실시예(256)	화합물(1-24)	6.8	9.1	5000.0	54.7	111.5	(0.31, 0.60)
실시예(257)	화합물(2-13)	6.8	11.1	5000.0	45.1	147.6	(0.33, 0.61)
실시예(258)	화합물(2-14)	6.8	10.7	5000.0	46.7	129.7	(0.32, 0.61)
실시예(259)	화합물(2-15)	6.9	9.5	5000.0	52.9	137.2	(0.33, 0.60)
실시예(260)	화합물(2-16)	6.6	10.9	5000.0	46.0	114.4	(0.32, 0.61)
실시예(261)	화합물(2-17)	6.7	10.5	5000.0	47.8	125.5	(0.31, 0.60)
실시예(262)	화합물(2-18)	6.6	10.1	5000.0	49.5	111.8	(0.31, 0.61)
실시예(263)	화합물(2-19)	6.6	9.7	5000.0	51.6	137.3	(0.31, 0.60)
실시예(264)	화합물(2-20)	6.8	9.5	5000.0	52.4	108.6	(0.33, 0.61)
실시예(265)	화합물(2-21)	6.5	11.0	5000.0	45.7	144.1	(0.30, 0.60)
실시예(266)	화합물(2-22)	7.0	10.4	5000.0	48.3	145.5	(0.31, 0.61)
실시예(267)	화합물(2-23)	6.6	10.3	5000.0	48.5	147.3	(0.31, 0.60)
실시예(268)	화합물(2-24)	6.6	9.1	5000.0	55.0	142.1	(0.33, 0.61)
실시예(269)	화합물(2-25)	6.8	10.5	5000.0	47.7	92.0	(0.32, 0.61)
실시예(270)	화합물(2-26)	6.6	10.1	5000.0	49.5	96.7	(0.33, 0.60)
실시예(271)	화합물(2-27)	6.9	9.2	5000.0	54.6	144.3	(0.32, 0.61)
실시예(272)	화합물(2-28)	6.9	10.0	5000.0	49.9	103.5	(0.31, 0.60)
실시예(273)	화합물(2-29)	6.7	9.4	5000.0	53.2	93.1	(0.31, 0.61)
실시예(274)	화합물(2-30)	6.6	11.0	5000.0	45.6	135.7	(0.31, 0.60)
실시예(275)	화합물(2-31)	6.8	10.0	5000.0	50.2	108.4	(0.33, 0.61)

[0376]

실시예(276)	화합물(2-32)	7.0	10.8	5000.0	46.4	149.4	(0.30, 0.60)
실시예(277)	화합물(3-24)	6.8	9.9	5000.0	50.5	120.4	(0.31, 0.61)
실시예(278)	화합물(4-13)	7.0	9.2	5000.0	54.6	117.8	(0.31, 0.60)
실시예(279)	화합물(4-14)	6.5	9.1	5000.0	54.7	105.8	(0.33, 0.61)
실시예(280)	화합물(4-15)	6.9	10.8	5000.0	46.2	125.1	(0.32, 0.61)
실시예(281)	화합물(4-16)	6.6	11.0	5000.0	45.5	116.9	(0.33, 0.60)
실시예(282)	화합물(4-17)	6.9	10.6	5000.0	47.3	90.8	(0.31, 0.60)
실시예(283)	화합물(4-18)	6.9	9.1	5000.0	54.9	140.7	(0.31, 0.61)
실시예(284)	화합물(4-19)	6.8	10.6	5000.0	47.1	141.8	(0.31, 0.60)
실시예(285)	화합물(4-20)	6.9	11.1	5000.0	45.2	134.9	(0.33, 0.61)
실시예(286)	화합물(4-21)	6.9	9.7	5000.0	51.5	110.7	(0.30, 0.60)
실시예(287)	화합물(4-22)	7.0	9.8	5000.0	51.1	93.7	(0.31, 0.61)
실시예(288)	화합물(4-23)	6.8	9.5	5000.0	52.9	105.9	(0.31, 0.60)
실시예(289)	화합물(4-24)	7.0	9.7	5000.0	51.5	110.7	(0.33, 0.61)
실시예(290)	화합물(4-25)	6.9	9.3	5000.0	53.8	122.4	(0.32, 0.61)
실시예(291)	화합물(4-26)	6.8	9.8	5000.0	51.0	94.4	(0.33, 0.60)
실시예(292)	화합물(4-27)	6.9	10.5	5000.0	47.6	102.8	(0.32, 0.61)
실시예(293)	화합물(4-28)	6.6	9.4	5000.0	53.4	98.7	(0.31, 0.60)
실시예(294)	화합물(4-29)	6.6	10.9	5000.0	45.7	129.0	(0.31, 0.61)
실시예(295)	화합물(4-30)	6.6	10.2	5000.0	48.8	125.1	(0.31, 0.60)
실시예(296)	화합물(4-31)	6.7	10.5	5000.0	47.4	133.2	(0.33, 0.61)
실시예(297)	화합물(4-32)	6.6	11.1	5000.0	45.0	124.7	(0.30, 0.60)
실시예(298)	화합물(5-24)	6.5	9.1	5000.0	54.8	92.3	(0.31, 0.61)
실시예(299)	화합물(6-13)	7.0	9.8	5000.0	50.9	91.4	(0.31, 0.60)
실시예(300)	화합물(6-14)	6.6	9.5	5000.0	52.8	119.5	(0.33, 0.61)
실시예(301)	화합물(6-15)	6.5	11.0	5000.0	45.4	129.4	(0.32, 0.61)
실시예(302)	화합물(6-16)	7.0	9.6	5000.0	52.3	132.2	(0.33, 0.60)
실시예(303)	화합물(6-17)	6.6	9.4	5000.0	53.4	118.4	(0.32, 0.61)
실시예(304)	화합물(6-18)	7.0	9.5	5000.0	52.5	92.7	(0.31, 0.60)
실시예(305)	화합물(6-19)	6.8	10.4	5000.0	48.3	129.7	(0.31, 0.61)
실시예(306)	화합물(6-20)	7.0	10.5	5000.0	47.5	131.8	(0.31, 0.60)
실시예(307)	화합물(6-21)	6.8	10.2	5000.0	49.1	148.2	(0.33, 0.61)
실시예(308)	화합물(6-22)	6.9	10.6	5000.0	47.1	105.1	(0.31, 0.60)
실시예(309)	화합물(6-23)	7.0	10.1	5000.0	49.7	114.0	(0.33, 0.61)
실시예(310)	화합물(6-24)	6.5	10.2	5000.0	48.9	134.5	(0.32, 0.61)
실시예(311)	화합물(6-25)	6.5	11.1	5000.0	45.2	142.9	(0.33, 0.60)

[0377]

실시예(312)	화합물(6-26)	6.9	9.5	5000.0	52.8	108.2	(0.32, 0.61)
실시예(313)	화합물(6-27)	6.9	11.0	5000.0	45.3	98.4	(0.31, 0.60)
실시예(314)	화합물(6-28)	6.6	9.5	5000.0	52.7	109.0	(0.31, 0.61)
실시예(315)	화합물(6-29)	6.8	11.0	5000.0	45.4	143.0	(0.31, 0.60)
실시예(316)	화합물(6-30)	6.7	10.1	5000.0	49.3	149.2	(0.33, 0.61)
실시예(317)	화합물(6-31)	6.8	10.1	5000.0	49.4	125.0	(0.30, 0.60)
실시예(318)	화합물(6-32)	6.8	10.0	5000.0	50.2	136.8	(0.31, 0.61)

[0378]

[0379]

상기 표 6 및 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광보조층의 재료로 사용한 유기전기발광 소자는 발광보조층을 형성하지 않은 유기전기발광소자와 비교화합물 B 내지 F를 발광보조층의 재료로 사용한 유기전기발광소자에 비해 발광효율 및 수명이 현저히 개선되었다.

[0380]

발광보조층을 사용하지 않았을 경우보다 발광보조층을 사용하였을 경우가 구동전압은 동일하거나 약간 상승하였지만, 효율 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있었으며, 비교화합물 B 내지 F보다 본 발명의 화합물이 더 우수한 효율 및 수명 결과를 나타낸 것을 확인할 수 있다. 이는 본 발명의 화합물이 단독으로 발광보조층으로 사용될 경우 높은 T1 에너지 레벨과 깊은 HOMO 에너지 레벨을 갖게 되는데 이로 인해 정공과 전자가 전하균형(charge

balance)을 이루고 정공수송층 계면이 아닌 발광층 내부에서 발광이 이루어져 더 높은 효율 및 수명을 극대화시켜주기 때문인 것으로 판단된다. 또한 표 4 및 표 5에서 설명한 것과 같이 유사한 7원 화합물임에도 불구하고 헥테로 원자의 종류 및 융합된(fused) 위치에 따라 소자특성이 다른 것을 확인할 수 있는데, 이는 헥테로 고리의 원소의 종류 그리고 융합된(fused) 위치에 따라 화합물의 특성이 현저히 달라질 수 있음을 시사하고 있다.

[0381] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

- | | | |
|--------|-------------|------------|
| [0382] | 100: 유기전기소자 | 110: 기판 |
| | 120: 제 1전극 | 130: 정공주입층 |
| | 140: 정공수송층 | 141: 버퍼층 |
| | 150: 발광층 | 151: 발광보조층 |
| | 160: 전자수송층 | 170: 전자주입층 |
| | 180: 제 2전극 | |

도면

도면1

100

